Die Verteilung der Adsorptionszeit und ihre Schätzung beim Markoff'schen Prozeß mit einem reflektierenden und einem adsorbierenden Rand

Inauguraldissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Georg-August-Universität
zu Göttingen

vorgelegt von
Wolfgang Schmidt
aus Essen

Göttingen 1966

Die Verteilung der Adsorptionszeit und ihre Schätzung beim Markoff'schen Prozeß mit einem reflektierenden und einem adsorbierenden Rand

Inauguraldissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Georg-August-Universität
zu Göttingen

vorgelegt von
Wolfgang Schmidt
aus Essen

Göttingen 1966

Referent: Professor Dr. Konrad Jacobs

Korreferent: Professor Dr. Max Deuring

Tag der mündlichen Prüfung: 25. Februar 1966

Die Verteilung der Adsorptionszeit und ihre Schätzung beim Markoff'schen Prozeß mit einem reflektierenden und einem adsorbierenden Rand

Inauguraldissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Georg-August-Universität
zu Göttingen

vorgelegt von
Wolfgang Schmidt
aus Essen

Göttingen 1966

Referent: Professor Dr. Konrad Jacobs

Korreferent: Professor Dr. Max Deuring

Tag der mündlichen Prüfung: 25. Februar 1966

D 7

Ich danke dem Direktor des Instituts für Pflanzenpathologie und Pflanzenschutz der Göttinger Universität, Herrn Prof. Dr. W. H. FUCHS, der mich zu dieser Arbeit angeregt hat, und dem ehemaligen Direktor des Instituts für Mathematische Statistik und Wirtschaftsmathematik der Göttinger Universität, Herrn Prof. Dr. K. JACOBS sowie seinem Assistenten Herrn Dr. H. KLINGER für die vielen Gespräche, die mich bei der Abfassung der vorliegenden Arbeit sehr gefördert haben.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41544307_0033

Inhalt

Seite

Verzeichnis der benutzten Symbole i

1. EINLEITUNG

1. Markoff'sche Prozesse als Modelle für Vergiftungsvorgänge 1
2. Ziel und Aufbau der Arbeit 6

2. DIE LAPLACE-TRANSFORMIERTE DER ADSORPTIONSZEITVERTEILUNG 8

1. Sätze aus der Theorie der Laplace-Transformation 8
2. Die Laplace-Transformierte $L\{p_{k,N}(t)\} = \psi_{k,N}(s)$ 14
3. Beziehungen zu verwandten Prozessen 17
4. Approximation der Adsorptionszeitverteilung für großes N 20
5. Erwartungswert und Varianz der Adsorptionszeit 40

3. KONVERGENTE REIHENENTWICKLUNGEN FÜR DIE VERTEILUNG DER ADSORPTIONSZEIT 41

1. Meromorphie von $\psi^*(s/\mu_1, \mu_2; \xi)$ 41
2. Erste Reihenentwicklung für P(t) und p(t) 46
3. Zweite Reihenentwicklung für P(t) und p(t) 50

4. APPROXIMATIONEN VON MAXIMUM-LIKELIHOOD-SCHÄTZFUNKTIONEN 58

1. Diskussion der Reihenentwicklungen 58
2. Zweite Approximation der Adsorptionszeitverteilung für großes N 60
3. Approximation von Maximum-Likelihood-Schätzfunktionen 64
4. Diskussion 67
5. Verbesserte Maximum-Likelihood-Schätzfunktionen für den Hypothesenraum $\Omega^+_{\xi>0}$ 69

Literaturverzeichnis 74

Adsorptionszeitverteilungen von Prozessen mit diskreten Zuständen:

	Zustandsbereich	Ränder	Bedingung
$P_{k,N}(t/\lambda,\mu)$	$\{0,1,\ldots,N-1,N\}$	n=0 reflektierend n=N adsorbierend	-
$P^{(aa)}_{k}(t/\lambda,\mu)$		n=0 n=N adsorbierend	Adsorption bei N oder bei 0
$P^{(aa)}_{k,N}(t/\lambda,\mu)$			Adsorption bei N
$P^{(aa)}_{k,0}(t/\lambda,\mu)$			Adsorption bei 0
$P^{(.a)}_{k}(t/\lambda,\mu)$	$\{\ldots,-1,0,1,\ldots,N\}$	$n = -\infty$ n=N adsorbierend	-

Die zugehörigen Verteilungsdichten werden, so weit sie existieren, mit p und deren Laplace-Transformierten mit γ bei jeweils derselben Indizierung bezeichnet. Zuweilen werden die Parameter λ, μ nicht mitgeschrieben.

Die zugehörigen Grenzverteilungen (für $N \to \infty$, Adsorptionszeitverteilungen von Prozessen mit stetigen Zuständen) heißen in derselben Reihenfolge

	Zustands-bereich	Ränder	Bedingung
$P(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$	$[0,1]$	Reflexion bei 0 Adsorption bei 1	-
$P^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$	$[0,1]$	Adsorption bei 0 Adsorption bei 1	Adsorption bei 1 oder 0
$P^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi, 1)$	$[0,1]$		Adsorption bei 1
$P^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi, 0)$	$[0,1]$		Adsorption bei 0
$P^{(.a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$	$(-\infty,1]$	Adsorption bei 1	-

Für die zugehörigen Verteilungsdichten und deren Laplace-Transformierten gilt entsprechendes wie bei diskreten Zuständen.

$\tilde{p}_0(t/\mu_1,\mu_2;0)$. S. 70

$Q(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = P^{(.a)}(t/|\mu_1|,\mu_2;\xi)$. S. 64

$q(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = p^{(.a)}(t/|\mu_1|,\mu_2;\xi)$. S. 67

$q = \sqrt{\frac{\mu}{\lambda}}$. S. 16

$\mathfrak{R}$ s. Realteil von s

$\mathfrak{r}$ Dimension des Stichprobenraums, S. 65

$s = x + iy$. Komplexes Argument der Laplace-Transformierten.

$s' = \frac{s+\lambda+\mu}{\sqrt{\lambda\mu}}$. S. 16

$\bar{t}, \frac{\overline{1}}{t}$. Arithmetisches und reziprokes harmonisches Mittel der Stichproben-Einzelwerte, S. 65

V.P. (Cauchy'scher) Hauptwert (Valor principalis).

$$\int_{x_0-i\infty}^{x_0+i\infty} = \lim_{y\to+\infty} \int_{x_0-iy}^{x_0+iy}, \quad \text{S. 11}$$

ξ. Anfangszustand des Prozesses mit stetigen Zuständen, S. 21

$x^{(.a)}$ Schätzfunktion für ξ, S. 66

v_1, v_2. S. 25

w_1, w_2. S. 15

EINLEITUNG

1. Markoff'sche Prozesse als Modelle für Vergiftungsvorgänge.

Setzt man ein Lebewesen einer Droge aus, so wird es nach einiger Zeit, wenn es hinreichend viel von der Droge aufgenommen hat, eine Reaktion zeigen (z.B. Tod durch Vergiftung). Als wahrscheinlichkeitstheoretische Modelle für den Vorgang der Drogen-Aufnahme (Vergiftung) bieten sich Markoff'sche Prozesse mit kontinuierlicher Zeit und endlichvielen Zuständen $0,1,\ldots,N$ an, deren Nummern den Grad der Vergiftung anzeigen. Bei einem solchen Prozeß sollen Zu- und Abnahme des Vergiftungsgrades möglich sein mit folgenden Einschränkungen: der giftfreie Zustand 0 erlaubt keine Verbesserung (das ist trivial); der Zustand N totaler Vergiftung ist endgültig (exitus). In der wahrscheinlichkeitstheoretischen Terminologie spricht man von einem Markoff'schen Prozeß mit (unelastisch) reflektierendem Rand 0 und absorbierendem Rand N. - Wir wollen überdies räumliche Homogenität im Innern des Zustandsraumes voraussetzen.

Im einzelnen sieht ein solches Modell folgendermaßen aus:

A. Allgemeine Gestalt eines Markoff'schen Prozesses mit kontinuierlicher Zeit und Zustandsraum $\{0,1,\ldots,N\}$:

Gegeben sind Übergangswahrscheinlichkeiten

$$P(k,\ t \mid i,\ s) \geq 0 \qquad (0 \leq s \leq t; \qquad i,k = 0,\ldots,N)$$

$$\text{mit} \sum_{k=0}^{N} P(k,\ t \mid i,\ s) = 1 \qquad (0 \leq s \leq t; \quad i = 0,\ldots,N),$$

$$P(k,\ t \mid i,\ t) = \delta_{ik} \qquad (0 \leq t; \ i,\ k = 0,\ldots,N),$$

die der Chapman-Kolmogoroff'schen Gleichung

$$P(k,t \mid i,s) = \sum_{j=0}^{N} P(k,t \mid j,u)\ P(j,u \mid i,s)$$

$$(0 \leq s \leq u \leq t)$$

genügen. Gibt man sich eine Anfangsverteilung P in $\{0,\ldots,N\}$ an, so erhält man mittels des Kolmogoroff'schen Fortsetzungstheorems eine eindeutig bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilung im Raume aller über der Halbachse $[0,\infty)$ definierten Funktionen mit Werten aus $\{0,\ldots,N\}$, die als das Markoff'sche Maß zur Anfangsverteilung P

und den obigen Übergangswahrscheinlichkeiten bezeichnet wird. Wir wollen überdies zeitliche Homogenität (Stationarität), d.h.

$$P(k,t \mid i,s) = P(k, t-s \mid i,o) \quad (o \le s \le t)$$

annehmen und $P_{ik}(t)$ statt $P(k,t \mid i,o)$ schreiben. Aus der Stetigkeitsannahme

$$\lim_{t \to o+o} P_{ik}(t) = \delta_{ik}$$

folgt dann die Existenz der Ableitungen

$$\lambda_{ik} = \lim_{t \to o+o} \frac{1}{t} (P_{ik}(t) - \delta_{ik})$$

und die Möglichkeit, das Markoff'sche Maß auf den Bereich der stückweise konstanten Funktionen mit rechtem und linkem Limes an jeder Stelle $t \ge o$ einzuschränken: die $P_{ik}(t)$ können aus den λ_{ik} zurückberechnet werden. Allgemein gilt

$$\lambda_{ik} \ge o \qquad (i \neq k),$$

$$\sum_{k=0}^{N} \lambda_{ik} = o \qquad (i = o,\ldots,N)$$

(vgl. Chung [8]).

B. Speziellere Annahmen.

Weitere naheliegende Forderungen an das Modell des Vergiftungsvorgangs schlagen sich in den folgenden Annahmen nieder:

$$\lambda_{i,i+1} = \lambda \ge o \qquad (o \le i < N) \qquad (1)$$

$$\lambda_{i,i-1} = \mu \ge o \qquad (o < i < N) \qquad (2)$$

$$\lambda_{i,k} = o \qquad (\text{sonst}); \qquad (3)$$

dies bedeutet: Es finden nur Übergänge der Schrittweite 1 statt ((3)), und die Übergangsintensitäten sind im Innern des Zustandsraums nur von der Schrittweite und -richtung abhängig, also räumlich homogen ((1), (2)). Daß N ein adsorbierender Zustand sei, drückt die Relation

$$\lambda_{N,N-1} = o \qquad (4)$$

aus. Der reflektierende Charakter des Zustands o bedarf keines besonderen Ausdrucks.

Im oben beschriebenen eingeschränkten Funktionenraum ist das (eventuell unendliche) Infimum der Zeitpunkte, zu denen eine Funktion den Wert N annimmt, eine Zufallsvariable, die als Adsorptionszeitpunkt (zum Zustand N) bezeichnet wird, unter der Annahme $\lambda > 0$ fastsicher endliche Werte hat und deren Verteilungsfunktion unter der Annahme, die Anfangsverteilung sei auf den Zustand k konzentriert, durch die oben wohldefinierte Funktion

$$P_{k,N}(t) \qquad (t \geq 0)$$

gegeben ist. Für $k \neq N$ besitzt $P_{k,N}(t)$ eine Dichte $\frac{d}{dt} P_{k,N}(t)$, die wir mit

$$p_{k,N}(t) = \frac{d}{dt} P_{k,N}(t) \quad (k \in \{0,1,2,\ldots,N-1\})$$

bezeichnen. Wir werden auch die Bezeichnungen $P_{k,N}(t/\lambda,\mu)$, $p_{k,N}(t/\lambda,\mu)$ anstelle von $P_{k,N}(t)$ bzw. $p_{k,N}(t)$ benutzen.
Die Parameter λ, μ des hier entworfenen Modells sind bei konkreten Untersuchungen den realen Bedingungen anzupassen, etwa auf dem Wege einer Schätzung aufgrund von Beobachtungswerten. Sie werden vor allem von der Gift-Konzentration, der das Lebewesen ausgesetzt wird, abhängen.

Die Verwendung Markoff'scher Modelle für Vorgänge der beschriebenen Art ist an sich nicht neu. Ich möchte aber betonen, daß das hier verwendete Modell sich von dem der sogenannten Treffertheorie durch die Zulassung der Möglichkeit $\mu > 0$ unterscheidet. In der Treffertheorie wird stets $\mu = 0$ vorausgesetzt.

Anschaulicher als in Abhängigkeit von den Übergangsintensitäten λ, μ läßt sich der betrachtete Prozeß in Abhängigkeit von den "differentialen Momenten" $\tilde{\mu}_{1,N}$ und $\tilde{\mu}_{2,N}$ verstehen, die aus λ und μ wie folgt abgeleitet sind: Es ist

$$\mu'_{\alpha,N}(t/i) = \sum_{j=0}^{N} (j-i)^{\alpha} P_{i,j}(t) \qquad (i \in \{0,1,\ldots,N\}, \alpha \geq 0 \text{ ganz})$$

$$= \sum_{j=-i}^{N-i} j^{\alpha} P_{i,i+j}(t)$$

das nichtzentrierte α-te Moment der Zustandsänderung j-i innerhalb des Zeitintervalls t, wenn zu Beginn dieses Intervalls der Prozeß sich im Zustand i befindet. Das differentiale Moment α-ter Ordnung im Zustand i ist definiert durch

$$\tilde{\mu}^{(i)}_{\varkappa,N} = \lim_{t\to 0+0} \frac{1}{t}\left[\mu'_{\varkappa,N}(t/i) - \mu'_{\varkappa,N}(0/i)\right] \qquad (5a)$$

$$= \lim_{t\to 0+0} \frac{1}{t}\left[\sum_{j=-i}^{N-i} j^{\varkappa} P_{i,i+j}(t) - \delta_{0\varkappa}\right]$$

$$= \sum_{j=-i}^{N-i} \lambda_{i,i+j}\, j^{\varkappa}, \qquad (5b)$$

woraus sich für $1 \le i \le N-1$ aufgrund der über $\lambda_{i,k}$ gemachten speziellen Voraussetzungen ergibt

$$\tilde{\mu}^{(i)}_{\varkappa,N} = \lambda + (-1)^{\varkappa}\mu \qquad (\varkappa = 0,1,\ldots;\ i = 1,\ldots,N-1) \qquad (6)$$

Da $\tilde{\mu}^{(i)}_{\varkappa,N}$ von i nicht abhängt, schreiben wir kurz $\tilde{\mu}_{\varkappa,N}$ statt $\tilde{\mu}^{(i)}_{\varkappa,N}$.

Die Gleichung

$$\tilde{\mu}_{1,N} = \lambda - \mu \in (-\infty, +\infty) \qquad (7a)$$

läßt sich aufgrund von (5a) als Erwartungswert der mittleren Geschwindigkeit, mit der innerhalb kleiner Zeiten die Zustände im Inneren des Zustandsbereichs durchlaufen werden, deuten, und

$$\tilde{\mu}_{2,N} = \lambda + \mu \in (0, +\infty) \qquad (7b)$$

ist die innerhalb kleiner Zeiten auf die Zeiteinheit entfallende Varianz des Endzustandes um den Anfangszustand.

Neben den $\tilde{\mu}^{(i)}_{\varkappa,N}$ sind, für den Grenzübergang $N \to \infty$ (vgl. 2.4), die "normierten differentialen Momente" $\mu^{(i)}_{\varkappa,N}$ von Bedeutung, die in Anlehnung an (5b) wie folgt definiert werden:

Definition: Die aus den Zuständen 0,1,...,N abgeleiteten Größen $0 = \frac{0}{N}, \frac{1}{N}, \frac{2}{N}, \ldots, \frac{N}{N} = 1$ heißen "normierte Zustandsgrößen" des Prozesses.

Die mit ihnen gebildeten Größen

$$\mu^{(i)}_{\varkappa,N} = \sum_{j=-i}^{N-i} \lambda_{i,i+j} \left(\frac{j}{N}\right)^{\varkappa} \qquad (\varkappa = 0,1,\cdots) \qquad (8)$$

heißen "normierte differentiale Momente (der Ordnung $\varkappa$)".

Die der Gleichung (6) entsprechende Beziehung lautet aufgrund der über die $\lambda_{i,k}$ getroffenen speziellen Voraussetzungen

$$\mu_{\varkappa,N} = \mu^{(i)}_{\varkappa,N} = \frac{\lambda}{N^{\varkappa}} + (-1)^{\varkappa}\,\frac{\mu}{N^{\varkappa}} \qquad (\varkappa = 0,1,\ldots;\ i=1,\ldots,N-1).$$

Insbesondere gelten die den Beziehungen (7a) und (7b) entsprechenden Formeln

$$\mu_{1,N} = \frac{\lambda-\mu}{N} = \frac{\tilde{\mu}_{1,N}}{N} \qquad \mu_{2,N} = \frac{\lambda+\mu}{N^2} = \frac{\tilde{\mu}_{2,N}}{N^2} \qquad (9)$$

mit

$$\mu_{1,N} \in (-\infty, +\infty), \qquad \mu_{2,N} \in (0, +\infty).$$

Für die Schätzung vergröberter Daten, die von λ,μ abhängen, gibt es seit langem ausgearbeitete Methoden, nämlich 1) die Probit-Analyse von sog. Zeit-Wirkungskurven. Dies Verfahren schätzt unter der Annahme, daß die Verteilungsfunktion des Sterbezeitpunktes durch $\Phi_{a,\,\sigma^2}(\log t)$ gegeben ist (wobei $\Phi_{a,\,\sigma^2}(x)$ die Normal-Verteilungsfunktion zum Erwartungswert a und zur Varianz σ^2 bedeutet), den Parameter a, evtl. auch σ^2, aufgrund der Beobachtung der Lebenszeit verschiedener Individuen unter der Einwirkung der Droge. Für die Details des Verfahrens vgl. SAMPFORD [21].

Eine Variante dieses Verfahrens fixiert einen Beobachtungszeitraum $[0,t)$ und beruht auf der Auszählung der in diesem Zeitraum gestorbenen Individuen aus einer der Droge ausgesetzten Population.

Schließlich hat man das Verfahren auch variiert, indem man die logistische statt der Normalverteilung nahm (sog. Logit-Analyse, vgl. BERKSON [2]).

Für die Untersuchung des Prozesses $P_{k,\,N}(t/\lambda,\mu)$ sind einige verwandte Prozesse bedeutsam. Fordert man (1) nur für $1 \le i < N$ und setzt $\lambda_{0,1} = 0$, so erhält man einen Prozeß mit zwei adsorbierenden Rändern n = 0 und n = N, dessen Adsorptionszeitverteilungsfunktion wir mit $P_k^{(aa)}(t/\lambda,\mu)$ $(k \in \{0,1,\ldots,N\})$ bezeichnen. Sie besitzt für $k \in \{1,\ldots,N-1\}$ eine Dichte $p_k^{(aa)}(t/\lambda,\mu) = \frac{d}{dt} P_k^{(aa)}(t/\lambda,\mu)$ und läßt sich in die Summe

$$P_k^{(aa)}(t/\lambda,\mu) = P_{k,N}^{(aa)}(t/\lambda,\mu) + P_{k,0}^{(aa)}(t/\lambda,\mu) \qquad (k \in \{0,1,\ldots N\}) \qquad (10)$$

der (nicht normierten) Verteilungen $P^{(aa)}_{k,N}$ für Adsorption an n = N und $P^{(aa)}_{k,0}$ für Adsorption an n = 0 zerlegen. Die für $k \in \{1, \ldots, N-1\}$ existierenden (nicht normierten) Dichten

$$p^{(aa)}_{k,N}(t/\lambda,\mu) = \frac{d}{dt} P^{(aa)}_{k,N}(t/\lambda,\mu) \text{ und } p^{(aa)}_{k,0}(t/\lambda,\mu) = \frac{d}{dt} P^{(aa)}_{k,0}(t/\lambda,\mu)$$

stehen mit der Dichte $p_{k,N}(t/\lambda,\mu)$ in der Beziehung

$$p_{k,N}(t/\lambda,\mu) = p^{(aa)}_{k,N}(t/\lambda,\mu) + \int_0^t p^{(aa)}_{k,0}(\tau/\lambda,\mu)\, p_{0,N}(t-\tau/\lambda,\mu)\, d\tau \qquad (11)$$

($k \in \{1, \ldots, N-1\}$). Wird der Zustandsbereich auf $\{\ldots, -2, -1, 0, 1, \ldots, N\}$ ausgedehnt, so erhält man, wenn die Gleichungen (1) und (2) auch für i = 0, -1, -2, ... gefordert werden, einen Prozeß mit nur einem (adsorbierenden) Rand, dessen Adsorptionszeitverteilungsfunktion wir mit $P^{(.a)}_k(t/\lambda,\mu)$ ($k \in \{N, N-1, \ldots\}$) bezeichnen werden. Für $k \neq N$ besitzt sie eine Dichte

$$p^{(.a)}_k(t/\lambda,\mu) = \frac{d}{dt} P^{(.a)}_k(t/\lambda,\mu).$$

1.2. Ziel und Aufbau der Arbeit.

Die vorliegende Arbeit ist zwei neuen Grenzwertsätzen für die Verteilung $P_{k,N}(t)$ und verschiedenen Anwendungen derselben gewidmet. Der Anlaß zu diesen Untersuchungen ergab sich bei der statistischen Auswertung toxikologischer Experimente.

Der erste Grenzwertsatz (Satz 2.4.1) bezieht sich auf den Grenzübergang $N \to \infty$ bei konvergentem

$$\frac{k}{N} \to \xi, \quad \mu_{1,N} = \frac{\lambda-\mu}{N} \to \mu_1, \quad \mu_{2,N} = \frac{\lambda+\mu}{N^2} \to \mu_2. \qquad (1)$$

Beim Beweis stütze ich mich auf eine von HEATHCOTE und MOYAL [16] hergeleitete explizite Formel für die Laplace-Transformierte der Dichte $p_{k,N}(t)$ bei gegebenen λ,μ. Es ergibt sich eine explizite Formel für die Laplace-Transformierte der Grenzverteilung. Erwartungswert und Varianz der Grenzverteilung werden daraus berechnet. Ferner wird die Grenzverteilung in die (nicht normierten) Verteilungen für Adsorption ohne bzw. mit vorausgehender Berührung des reflektierenden Randes zerlegt. Sie wird in zwei konvergente, die Verteilung für jedes $t \in (0, \infty)$ darstellende unendliche Reihen entwickelt, die aus den Eigenschaften der Laplace-Transformierten hergeleitet werden. Die erste Entwicklung ist asymptotisch für $t \to +\infty$, die zweite asymptotisch für $t \to 0$.

Der zweite Grenzwertsatz bezieht sich ebenfalls auf den Grenzübergang $N \to \infty$, jedoch werden die Bedingungen (1) ersetzt durch

$$\frac{k}{N} \to \gamma \,(k \neq N), \quad \mu_{1,N} = \frac{\lambda - \mu}{N} \to \mu_1 , \; \mu_{2,N} = \frac{\lambda + \mu}{N^2} \to \mu_2 . \qquad (2)$$

Diese zweite Grenzverteilung wird zur Herleitung handlicher Näherungen für die Maximum-Likelihood-Schätzfunktionen der Parameter μ_1 und μ_2 benutzt, und zwar für die Hypothesenräume

$$\left\{0 \leq \mu_1 < \infty, 0 < \mu_2, \xi = \xi_0\right\} \text{ und } \left\{-\infty < \mu_1 \leq 0, 0 < \mu_2, \quad \xi = \xi_0\right\} .$$

Schließlich wird im Fall $\xi = 0$ für die Dichte der Adsorptionszeitverteilung die verbesserte Näherung

$$\tilde{p}_0(t/\mu_1, \mu_2; 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi \mu_2}} \, \frac{t^{-3/2}}{1 + \mu_1 t} \, e^{-\frac{(1-\mu_1 t)^2}{2\mu_2 t}} \quad (\mu_1 \in [0, \infty))$$

hergeleitet, die für $t > 0$ positiv ist, ohne selbst normierte Dichte zu sein. Die formale Anwendung der Maximum-Likelihood-Methode liefert für die Schätzfunktionen m_1 und m_2 für μ_1 und μ_2 ein algebraisches Gleichungssystem.

2. DIE LAPLACE-TRANSFORMIERTE DER ADSORPTIONSZEITVERTEILUNG

Unter der Laplace-Transformierten $L\{f\}$ einer für $t \geq 0$ erklärten Funktion $f(t)$ wollen wir in der vorliegenden Arbeit das Lebesgue'sche Integral

$$\varphi(s) = L\{f\} = \int_0^\infty e^{-st} f(t)\,dt$$

als Funktion von s verstehen, sofern es (für gewisse s) existiert. s ist eine komplexe Veränderliche,

$$s = x + iy \qquad (i^2=-1),$$

und die Bezeichnungen

$$\Re s = x, \quad \Im s = y$$

für Realteil bzw. Imaginärteil von s werden gebraucht.

In der vorliegenden Arbeit treten als "Originalfunktionen" $f(t)$ nur absolut stetige Verteilungsfunktionen und die zugehörigen Dichten auf. Auf diesen Sonderfall zugeschnitten werden in der folgenden Ziffer die wichtigsten der aus der Theorie der Laplace-Transformation benötigten Sätze formuliert.

2.1. Sätze aus der Theorie der Laplace-Transformation

Satz 1: Ist $f(t)$ eine auf $t \geq 0$ erklärte Wahrscheinlichkeitsdichte, so konvergiert das Laplace-Integral

$$\varphi(s) = L\{f\} = \int_0^\infty e^{-st} f(t)\,dt \qquad (1)$$

mindestens in der Halbebene $\Re s \geq 0$.

Satz 2: Eine Laplace-Transformierte ist im Innern ihrer Konvergenzhalbebene holomorph (DOETSCH [9], Satz 1 S. 144).

Bemerkung: Gelegentlich ist nicht die Laplace-Transformierte $L\{f\} = \varphi(s)$, sondern die durch das Laplace-Integral definierte analytische Funktion $\varphi^*(s)$, mit einem die Konvergenzhalbebene des Integrals u.U. echt enthaltenden Holomorphiegebiet, von unmittelbarem Interesse (vgl. z.B. Satz 7 und Ziffer 3.1). $\varphi^*(s)$ ist dann die analytische Fortsetzung von $\varphi(s) = L\{f\}$.

Eine Funktion $N(t)$ mit der Eigenschaft $\int_0^t N(\tau)\,d\tau \equiv 0$ $(t > 0)$ heißt "Nullfunktion". Für das Lebesgue'sche Integral sind Nullfunktionen genau die Funktionen $N(t)$, die auf einer Menge vom Lebesgue'schen Maß 0 von Null verschieden sind. Mit $N(t)$ ist

auch $e^{-st}N(t)$ Nullfunktion, so daß $L\{N(t)\} \equiv 0$ für jede Nullfunktion. Es gilt

Satz 3 (DOETSCH [9], Satz 1 S.72): Stimmen die zu zwei Originalfunktionen gehörigen Bildfunktionen in einer Halbebene überein, so unterscheiden sich die Originalfunktionen nur um eine Nullfunktion.

Zwischen der Laplace-Transformierten $L\{f\} = \varphi(s)$ der Dichte $f(t)$ einer absolut stetigen Verteilung und deren charakteristischer Funktion $E\{ity\}$ besteht der Zusammenhang

$$\varphi(-iy) = E\{ity\} .$$

Der Lévy-Cramér'sche Grenzwertsatz in der in dieser Arbeit benötigten speziellen Form läßt sich damit wie folgt formulieren (SCHMETTERER [22], Satz 16 S. 55):

Satz 4: Eine Folge von absolut stetigen Verteilungsfunktionen $\{F_m(t)\}$ konvergiert genau dann gegen eine Verteilungsfunktion $F(t)$, wenn die zugehörige Folge der charakteristischen Funktionen $\varphi_m(-iy)$ in $(-\infty < y < \infty)$ gegen eine stetige Funktion $\varphi(-iy)$ konvergiert. Diese ist stets die zur Grenzfunktion $F(t)$ gehörige charakteristische Funktion.

Satz 5: Zu einer Folge absolut stetiger Verteilungsfunktionen $\{F_m(t) = \int_0^t f_m(\tau)d\tau\}$ existiere eine negative obere Schranke $x_0 < 0$ für die Konvergenzabszissen der Laplace-Integrale $L\{f_m\}$ der Dichten.
Konvergiert die Folge $\varphi_m(s) = L\{f_m\}$ in einer Halbebene $\Re s > x_1$ mit $x_0 < x_1 < 0$ gegen eine dort holomorphe Grenzfunktion $\varphi(s) \not\equiv 0$ und ist $\varphi(s)$ Laplace-Transformierte in irgendeiner echten Halbebene, so hat die Grenzverteilungsfunktion $F(t) = \lim_{m\to\infty} F_m(t)$ eine Dichte $f(t)$, und es gilt $\varphi(s) = L\{f\}(\Re s \geq 0)$.

Beweis: Da die f_m nach Voraussetzung Verteilungsdichten sind, stimmen die Lebesgue'schen Integrale $L\{f_m\}$ auf $\Re s = 0$ mit den charakteristischen Funktionen der f_m überein (vgl. Bemerkung nach Satz 2.1.3). Damit folgt aus der Konvergenzvoraussetzung über die φ_m die Existenz einer Grenzverteilung $F(t)$ nach Satz 4, mit der charakteristischen Funktion

$$\varphi(-iy) = \int_0^\infty {}^{ST} e^{ity}\, dF(t).$$

($\int^{ST}$ = Lebesgue-Stieltjes-Integral, $\int^{L}$ = Lebesgue-Integral). Diese auf $\Re s = 0$ erklärte Funktion ist natürlich in die Halbebene $\Re s > x_1$ hinein analytisch in die dort holomorphe Funktion $\varphi(s)$ fortsetzbar.

Nach Voraussetzung gibt es eine Funktion $g(t)$ und eine reelle Zahl x_1', so daß

$$\int_0^\infty {}^{L} e^{-st} g(t)\, dt = \varphi(s) \qquad (\Re s > x_1').$$

Auch das links stehende Integral ist somit in $\Re s > x_1$ hinein in die Funktion $\varphi(s)$ fortsetzbar, woraus folgt, daß

$$\int_0^\infty {}^{L} e^{-st} g(t)\, dt \quad (\Re s > x_1') \text{ die analytische Fort-}$$

setzung von

$$\begin{aligned} \varphi(iy) &= \int_0^\infty {}^{ST} e^{-ity}\, dF(t) \\ &= \int_0^\infty {}^{L} e^{-ity}\, dF(t) + \sum_j e^{-it_j y}\, dF(t_j) \end{aligned}$$

ist, wobei die $dF(t_j)$ die an höchstens abzählbar vielen Stellen t_j vorhandenen Sprünge der Grenzverteilung $F(t)$ sind. Die analytische Fortsetzung dieser Funktion lautet

$$\varphi(s) = \varphi(x+iy) = \int_0^\infty {}^{L} e^{-st}\, dF(t) + \sum_j e^{-st_j}\, dF(t_j).$$

Die rechte Seite ist jedoch nur dann Laplace-Transformierte, wenn $dF(t_j) = 0$ für alle j, weil die Funktionen e^{-st_j} keine Laplace-Transformierten sind (DOETSCH [9], S. 163 f). Insgesamt erhalten wir

$$\int_0^\infty e^{-st} g(t)dt \equiv \int_0^\infty e^{-st}\, d\,F(t) \quad (\Re s > x_2),$$

wenn mit x_2 die größere der Konvergenzabszissen beider Integrale bezeichnet wird. Nach Satz 3 stimmt $g(t)$ bis auf eine Nullfunktion mit der Dichte von $F(t)$ überein.

Damit ist der Satz bewiesen.

Satz 6: Sei $\varphi(s) = L\{F\}$ und $F(t)$ absolut stetige Verteilungsfunktion mit $F(t) = 0$ für $t < 0$. An jeder Stelle $t \in (-\infty, \infty)$ gilt die Umkehrformel

$$L^{-1}\{\varphi\} = \text{V.P.}\ \frac{1}{2\pi i} \int_{x_0-i\infty}^{x_0+i\infty} e^{ts}\ \varphi(s)ds = \begin{cases} F(t) & (t \in [0,\infty)) \\ 0 & (t \in (-\infty,0]) \end{cases} \qquad (2)$$

für jedes $x_0 > 0$.

Zum Beweis vgl. DOETSCH [9], Satz 3 S. 212. Als Verteilungsfunktion erfüllt $F(t)$ die in diesem Satz formulierte Voraussetzung beschränkter Variation.

Aufgrund von Satz 6 läßt sich aus $\varphi(s)$ die Verteilungsfunktion $F(t)$ unter bestimmten Voraussetzungen durch Residuenrechnung in eine unendliche Reihe entwickeln:
$\varphi(s) = L\{F\}$ konvergiere absolut auf der Geraden $\Re s = x_0$ und damit in der Halbebene $\Re s \geq x_0$. $\varphi(s)$ sei in die Halbebene $\Re s < x_0$ hinein (wo $L\{F\}$ nicht zu konvergieren braucht) analytisch fortsetzbar, wodurch eine analytische Funktion $\overset{*}{\varphi}(s)$ entsteht, die in einem Gebiet $\mathcal{G} \supset \{\Re s \geq x_0\}$ erklärt ist und in $\Re s \geq x_0$ mit $\varphi(s) = L\{F\}$ übereinstimmt.

Satz 7:

1) $F(t)$ sei absolut stetige Verteilungsfunktion und $\overset{*}{\varphi}(s) = L\{F\}^*$ eine meromorphe Funktion mit den abzählbar unendlich vielen Polstellen $s_1, s_2, \ldots$.

2) Auf der Geraden $\Re s = x_o$ absoluter Konvergenz des L-Integrals seien die Punktpaare $(x_o + iy_j,\ x_o - iy_j)$ $(j = 1,2,\ldots)$ so gewählt, daß $y_j \to +\infty$ für $j \to +\infty$.

3) Das j-te Punktpaar werde durch eine ganz in der Halbebene $\Re s \leq x_o$ verlaufende glatte Kurve $\mathcal{L}_j$ so verbunden, daß $\mathcal{L}_j$ zusammen mit der Geraden $\Re s = x_o$ genau die Polstellen $s_1, s_2, \ldots, s_j$ einschließt $(j = 1,2,\ldots)$.

4) $\varphi^*(s)$ verhalte sich so, daß gilt

$$\lim_{j\to\infty} \int_{\mathcal{L}_j} e^{ts}\ \varphi^*(s)\ ds = 0.$$

Dann gilt

$$F(t) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \operatorname{Res}\ (e^{ts}\ \varphi^*(s) / s_\nu). \tag{3}$$

Beweis: Aufgrund des Residuensatzes besteht (bei geeigneter Parameterdarstellung des Weges $\mathcal{L}_j$) die Gleichung

$$\left(\int_{x_o-iy_j}^{x_o+iy_j} + \int_{\mathcal{L}_j}\right) \frac{1}{2\pi i}\, e^{ts}\ \varphi^*(s)\ ds = \sum_{\nu=0}^{j} \operatorname{Res}\ (e^{ts}\ \varphi^*(s) / s_\nu).$$

Führt man in ihr den Grenzübergang $j \to +\infty$ durch, so konvergiert auf der linken Seite der erste Summand nach Satz 6 gegen $F(t)$, der zweiter nach Voraussetzung 4) gegen Null. Die Behauptung des Satzes ergibt sich hieraus unmittelbar.

Satz 8: Eine Funktion $\varphi(s)$ sei als unendliche Reihe von Laplace-Transformierten darstellbar:

$$\varphi(s) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \varphi_\nu(s), \qquad \varphi_\nu(s) = L\{f_\nu(t)\},$$

wobei speziell folgendes gelten soll:

1) Für ein reelles x_o existiere

$$\int_0^\infty e^{-x_o t}\ |f_\nu(t)|\ dt \qquad (\nu = 0,1,\ldots), \tag{4}$$

so daß auch $\varphi_\nu(s) = L\{f_\nu\}$ für $\Re s \geq x_o$ $(\nu = 0,1,\ldots)$ existiert;

2) Es konvergiere

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \int_0^\infty e^{-x_o t}\ |f_\nu(t)|\ dt, \tag{5}$$

so daß erst recht

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \varphi_\nu(s) = \varphi(s)$$

für $\Re s \geq x_o$ (gleichmäßig) konvergiert.

Dann konvergiert $\sum_{\nu=0}^{\infty} f_\nu(t)$ absolut gegen eine Funktion f(t) für fast alle t, und es ist $L\{f\} = \varphi(s)$ für $\Re s \geq x_0$, d. h.

$$L\left\{\sum_{\nu=0}^{\infty} f_\nu(t)\right\} = \sum_{\nu=0}^{\infty} L\{f_\nu(t)\} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \varphi_\nu(s) \quad \text{für } \Re s \geq x_0 .$$

Zum Beweis vgl. DOETSCH [9], Satz 2 S. 305 f.

Eine Folgerung aus diesem Satz ist

Satz 9: Wenn die Laplace-Transformierten $L\{f_1\} = \varphi_1(s)$ und $L\{f_2\} = \varphi_2(s)$ Halbebenen absoluter Konvergenz besitzen und $h(z_1, z_2)$ eine im Nullpunkt $z_1 = z_2 = 0$ holomorphe und verschwindende Funktion der komplexen Veränderlichen z_1 und z_2 ist, so ist auch $h(\varphi_1(s), \varphi_2(s))$ eine Laplace-Transformierte mit einer Halbebene absoluter Konvergenz.

Dieser Satz ist ein Spezialfall des bei DOETSCH[9] , S. 307 bewiesenen Satzes 3.

Satz 10: Ist $\varphi(s) = L\{f(t)\}$ die Laplace-Transformierte der Funktion f(t) (t > 0), so ist $\varphi_1(s) = \varphi(as + b)$ für a > 0 und beliebig komplexes b ebenfalls Laplace-Transformierte, mit der Originalfunktion

$$f_1(t) = \frac{1}{a} e^{-\frac{b}{a}t} f\left(\frac{t}{a}\right) .$$

Satz 11: Besitzt f(t) eine Laplace-Transformierte, so auch die für t > 0 existierende Funktion

$$F(t) = \frac{t^{-\frac{3}{2}}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x e^{-\frac{x^2}{4t}} f(x)\,dx ,$$

und zwischen $\varphi(s) = L\{f\}$ und $\Phi(s) = L\{F\}$ besteht die Beziehung

$$\Phi(s) = \varphi(\sqrt{s}) ,$$

unter $\sqrt{s}$ den Hauptzweig verstanden.

Zum Beweis der beiden Sätze vgl. DOETSCH [9] , S. 86, Satz 2 und S. 139, Satz 4.

2.2. Die Laplace-Transformierte $L\{p_{k,N}(t)\} = \psi_{k,N}(s)$

Das System der Kolmogoroff'schen Rückwärtsgleichungen eines speziellen Markoff'schen Prozesses von der in 1.1 unter B beschriebenen Art lautet

$$p_{0,N} = \lambda P_{1,N} - \lambda P_{0,N}$$

$$p_{k,N} = \lambda P_{k+1,N} - (\lambda+\mu) P_{k,N} + \mu P_{k-1,N} \qquad (k = 1, \ldots, N-1)$$

$$P_{N,N} = \varepsilon(t) = \begin{cases} 1 & (t \geq 0) \\ 0 & (t < 0). \end{cases}$$

Durch die Transformation

$$L\{p_{k,N}\} = \psi_{k,N}(s/\lambda,\mu) = \int_0^\infty e^{-st} p_{k,N}(t)\, dt \qquad (k=0,1,\ldots,N-1) \qquad (1)$$

wird es in das System

$$\lambda \psi_{1,N} - (s+\lambda)\psi_{0,N} = 0 \qquad (2a)$$

$$\lambda \psi_{k+1,N} - (s+\lambda+\mu)\psi_{k,N} + \mu \psi_{k-1,N} = 0 \qquad (k=1,\ldots,N-1) \qquad (2b)$$

$$\psi_{N,N} \equiv 1 \qquad (2c)$$

für die Laplace-Transformierten (1) übergeführt. Die Funktion $\psi_{N,N} \equiv 1$ ist keine Laplace-Transformierte[1], sondern die Anfangsbedingung, unter der sich die Funktionen (1) aus dem System (2) berechnen lassen. Die Lösung ist im Jahre 1959 von HEATHCOTE und MOYAL [16] unter Benutzung erzeugender Funktionen für die $P_{k,N}$ gefunden worden und lautet

$$\psi_{k,N}(s/\lambda,\mu) = \frac{w_2^{k+1} - w_1^{k+1} - \frac{\mu}{\lambda}(w_2^k - w_1^k)}{w_2^{N+1} - w_1^{N+1} - \frac{\mu}{\lambda}(w_2^N - w_1^N)} \qquad (\lambda \in (0,\infty);\ \mu \in [0,\infty)), \qquad (3)$$

1) Sie wäre es bei Lebesgue-Stieltjes'scher Definition des Laplace-Integrals. Die Benutzung dieser Definition hätte für uns den Nachteil, daß Satz 2.1.5 nicht richtig wäre, in den wir bereits einen wesentlichen Teil der Beweislast unserer Grenzwertsätze gelegt haben. Unsere Grenzübergänge führen uns nämlich nicht aus dem Bereich der absolut stetigen Verteilungen hinaus. Dies war maßgebend bei der Wahl eines möglichst speziellen Integralbegriffs.

wobei

$$w_1 = \frac{1}{2\lambda}\left[s+\lambda+\mu-\sqrt{(s+\lambda+\mu)^2-4\lambda\mu}\right],$$

$$w_2 = \frac{1}{2\lambda}\left[s+\lambda+\mu+\sqrt{(s+\lambda+\mu)^2-4\lambda\mu}\right] \qquad (\lambda\in(0,\infty),\ \mu\in[0,\infty)) \quad (4)$$

die Nullstellen des dem System (2) zugeordneten charakteristischen Polynoms $\lambda w^2-(s+\lambda+\mu)w+\mu$ sind und deshalb der Gleichung

$$w_1 w_2 = \frac{\mu}{\lambda} \qquad (5)$$

genügen. Nach Satz 2.1. 1 konvergiert $L\{p_{k,N}\}$ mindestens in der Halbebene $\Re s \geq 0$. Durch Nullsetzen von s folgt aus (3)

$$\int_0^\infty p_{k,N}(t/\lambda,\mu)\,dt = 1 \qquad (\lambda\in(0,\infty))$$

für jedes $\mu\in[0,\infty)$. Der Fall $\mu = 0$ entspricht dem Modell der Treffertheorie und führt nach (3) und (4) auf

$$\psi_{k,N}(s/\lambda,0) = \left(\frac{\lambda}{s+\lambda}\right)^{N-k}. \qquad (6)$$

Beim Vergleich der Ausdrücke (3) und (4) mit den bei HEATHCOTE und MOYAL angegebenen (a.a.O. S. 407, (4.12), und S. 402, (2.3)) ist zu beachten, daß die Autoren den reflektierenden Rand nach n = N und den adsorbierenden Rand nach n = 0 gelegt haben, während in der vorliegenden Arbeit die umgekehrte Zuordnung zugrunde gelegt ist.

Außer der Laplace-Transformierten (3) werden keine weiteren Ergebnisse aus der Arbeit von HEATHCOTE und MOYAL benötigt.

Über das analytische Verhalten von $\psi_{k,N}(s)$ gibt folgender Satz Auskunft:

<u>Satz 1:</u> $\psi_{k,N}(s/\lambda,\mu) = L\{p_{k,N}(t/\lambda,\mu)\}$ ist für $\lambda\in(0,+\infty)$ und $\mu\in[0,+\infty)$ in der Halbebene $\Re s \geq 0$ eine von k und N abhängige gebrochen rationale Funktion ohne Polstellen.

Folgerung: $\psi_{k,N}(s)$ ist über $\Re s \geq 0$ hinaus in die ganze komplexe Zahlenebene mit Ausnahme von endlich vielen Punkten analytisch fortsetzbar. Die so in der s-Ebene erklärte gebrochen rationale Funktion $\psi^*_{k,N}(s)$ besitzt in den in der Halbebene $\Re s < 0$ gelegenen Ausnahmepunkten ihre sämtlichen Pole.

Beweis: Der auf die rechten Seiten von (4) angewandte binomische Satz führt für natürliches r auf

$$w_2^r - w_1^r = \frac{2\sqrt{(s+\lambda+\mu)^2-4\lambda\mu}}{(2\lambda)^r} \sum_{\varrho=0}^{\left[\frac{r-1}{2}\right]} \binom{r}{2\varrho+1} (s+\lambda+\mu)^{r-2\varrho-1} \left[(s+\lambda+\mu)^2-4\lambda\mu\right]^{\varrho}$$

$$= \frac{2\sqrt{(s+\lambda+\mu)^2-4\lambda\mu}}{(2\lambda)^r} \sum_{\nu=0}^{\left[\frac{r-1}{2}\right]} (-4\lambda\mu)^{\nu} \sum_{\varrho=\nu}^{\left[\frac{r-1}{2}\right]} \binom{r}{2\varrho+1} \binom{\varrho}{\nu} (s+\lambda+\mu)^{r-1-2\nu} . \quad (7)$$

Bei Anwendung dieser Formel auf (3) bleibt ein Quotient zweier Polynome in s übrig, was zu beweisen war. Die Aussage über die Lage der Polstellen ergibt sich daraus, daß $\psi_{k,N}(s/\lambda,\mu)$ in der Halbebene $\Re s > 0$ analytisch ist (auf $\Re s = 0$ gilt $|\psi_{k,N}(s/\lambda,\mu)| \leq 1$).

Für die spätere Anwendung wollen wir die Polynome, aus denen $\psi_{k,N}$ rational zusammengesetzt ist, noch näher untersuchen, und zwar unter der Voraussetzung $\mu > 0$. Mit den Abkürzungen

$$s' = \frac{s+\lambda+\mu}{\sqrt{\lambda\mu}} , \quad (8)$$

$$q = \sqrt{\frac{\mu}{\lambda}} \quad (9)$$

ergibt sich

$$w_1 = q\left(\frac{s'}{2} - \sqrt{\frac{s'^2}{4}-1}\right), \quad w_2 = q\left(\frac{s'}{2} + \sqrt{\frac{s'^2}{4}-1}\right). \quad (10)$$

Weiter ist

$$w_2^r - w_1^r = q^r\left[\left(\frac{s'}{2}+\sqrt{\frac{s'^2}{4}-1}\right)^r - \left(\frac{s'}{2}-\sqrt{\frac{s'^2}{4}-1}\right)^r\right]$$

$$= 2q^r\sqrt{\frac{s'^2}{4}-1} \sum_{\nu=0}^{\left[\frac{r-1}{2}\right]} \binom{r}{2\nu+1} \left(\frac{s'}{2}\right)^{r-2\nu-1} \left(\frac{s'^2}{4}-1\right)^{\nu},$$

so daß mit

$$Q_{r-1}(s') = \begin{cases} \sum_{\nu=0}^{\left[\frac{r-1}{2}\right]} \binom{r}{2\nu+1} \left(\frac{s'}{2}\right)^{r-2\nu-1} \left(\frac{s'^2}{4}-1\right)^{\nu} & (r=1,2,\cdots) \\ 0 & (r=0) \end{cases} \quad (11)$$

schließlich

$$w_2^r - w_1^r = 2q^r \sqrt{\frac{s'^2}{4} - 1}\; Q_{r-1}(s'). \qquad (12)$$

Aufgrund von (3) ergibt sich hieraus

$$\psi_{k,N}(s/\lambda,\mu) = q^{k-N} \frac{Q_k(s'(s)) - q\,Q_{k-1}(s'(s))}{Q_N(s'(s)) - q\,Q_{N-1}(s'(s))}$$

$$= q^{k-N} \frac{g_k(s'(s))}{g_N(s'(s))}\,, \qquad (13)$$

wenn wir

$$g_r(s') = Q_r(s') - q\,Q_{r-1}(s') \qquad (r = 0,1,2,\cdots) \qquad (14)$$

setzen. Die Polynome $g_r(s')$ genügen der Rekursionsformel

$$g_r(s') = s'g_{r-1}(s') - g_{r-2}(s')\,, \qquad (15)$$

weil die Polynome $Q_r(s')$ ihr genügen, wie sich aus

$$w_2^{r+1} - w_1^{r+1} = (w_2 + w_1)(w_2^r - w_1^r) - w_1 w_2 (w_2^{r-1} - w_1^{r-1})$$

wegen

$$w_1 + w_2 = qs', \qquad w_1 w_2 = q^2$$

mit Hilfe von (12) ergibt.

3. Beziehungen zu verwandten Prozessen

In der Einleitung wurde bereits auf Beziehungen zu den verwandten Prozessen $P_k^{(aa)}(t/\lambda,\mu)$ und $P_k^{(\cdot a)}(t/\lambda,\mu)$ hingewiesen (vgl. Ziffer 1.1). Die Laplace-Transformierten $\psi_k^{(aa)}(s/\lambda,\mu) = L\{p^{(aa)}(t/\lambda,\mu)\}$ und $\psi_k^{(\cdot a)}(s/\lambda,\mu) = L\{p_k^{(\cdot a)}(t/\lambda,\mu)\}$ genügen ebenfalls den Rückwärtsgleichungen 2.2(2b), jedoch ist im Falle zweier adsorbierender Ränder die Anfangsbedingung 2.2(2a) durch $\psi_{0,N} \equiv 1$ zu ersetzen. Das System bekommt dadurch die jetzt mit $\psi_k^{(aa)}$ bezeichnete Lösung

$$\psi_k^{(aa)}(s/\lambda,\mu) = \psi_{k,N}^{(aa)}(s/\lambda,\mu) + \psi_{k,0}^{(aa)}(s/\lambda,\mu)\,, \qquad (7)$$

wobei für $k = 1,\ldots,N-1$

$$\left.\begin{aligned} \psi_{k,N}^{(aa)}(s/\lambda,\mu) &= \frac{w_2^{\,k}-w_1^{\,k}}{w_2^{\,N}-w_1^{\,N}}\,, \qquad (2a)\\ \psi_{k,0}^{(aa)}(s/\lambda,\mu) &= \left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{k}\frac{w_2^{\,N-k}-w_1^{\,N-k}}{w_2^{\,N}-w_1^{\,N}} \qquad (2b)\end{aligned}\right\}\quad (\lambda\in(0,\infty),\ \mu\in[0,\infty)).$$

w_1 und w_2 sind durch 2.2(4) gegeben. Die Funktionen (2a) und (2b) genügen den Gleichungen 2.2(2b) auch je für sich allein, unter den Randbedingungen

$$\psi_{0,N}^{(aa)} \equiv 0,\ \psi_{N,N}^{(aa)} \equiv 1 \quad \text{bzw.} \quad \psi_{0,0}^{(aa)} \equiv 1,\ \psi_{N,0}^{(aa)} \equiv 0.$$

Ihnen entsprechen im Originalraum die (nicht normierten) Dichten $p_{k,N}^{(aa)}(t/\lambda,\mu)$ und $p_{k,0}^{(aa)}(t/\lambda,\mu)$ für Adsorption am Rand n = N bzw. am Rand n = 0. Durch Übersetzung der Gleichung (1) in den Originalraum ergibt sich 1.1(10) (jedoch für die Dichten). Die Anwendung von 2.2(7) auf (2a) und (2b) zeigt, daß $\psi_{k,N}^{(aa)}$ und $\psi_{k,0}^{(aa)}$ und folglich auch $\psi_k^{(aa)}$ ebenfalls gebrochen rational in s sind.

Beim Prozeß $P_k^{(\cdot a)}(t/\lambda,\mu)$ mit nur einem im Endlichen gelegenen Rand ist die Gültigkeit der Gleichungen 2.2(2b) auf die Fälle k=0,-1,-2,... auszudehnen und 2.2 (2a) zu streichen. Lösung ist sowohl $\frac{1}{w_1^{N-k}}$ als auch $\frac{1}{w_2^{N-k}}$. Da nur die letztere Funktion die Bedingung $\lim_{s\to+\infty}\varphi(s) = 0$ erfüllt, die für jede Laplace-Transformierte $\varphi(s)$ notwendig ist (vgl. DOETSCH [9], Satz 1, S. 162), haben wir

$$\psi_k^{(\cdot a)}(s/\lambda,\mu) = \frac{1}{w_2^{N-k}} \quad (k = N-1, N-2, \cdots, 1, 0, -1, \cdots). \qquad (3)$$

Im Gegensatz zu den bisher aufgetretenen Laplace-Transformierten ist $\psi_k^{(\cdot a)}$ nicht rational, da ihre analytische Fortsetzung, wie sich aus 2.2 (4) ergibt, die zwei Verzweigungspunkte erster Ordnung $s=-(\sqrt{\lambda}\mp\sqrt{\mu})^2$ besitzt.

Aus (3) und 2.2(4) folgt die Gleichung

$$\psi_k^{(\cdot a)}(0/\lambda,\mu) = \begin{cases} 1 & (\lambda \geq \mu) \\ \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{N-k} \in (0,1) & (\lambda < \mu)\,, \end{cases} \qquad (4)$$

der im Originalraum die Beziehung

$$\int_0^\infty P_k^{(\cdot a)}(t/\lambda,\mu)\,dt = \begin{cases} 1 & (\lambda \geq \mu) \\ \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{N-k} \in (0,1) & (\lambda < \mu) \end{cases} \qquad (5)$$

entspricht. $P_k^{(\cdot a)}(t/\lambda,\mu)$ ist somit nur im Falle $\lambda \geq \mu$ Verteilungsfunktion im engeren Sinn. Im Falle $\lambda < \mu$ besteht eine positive Wahrscheinlichkeit $1-\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{N-k}$ dafür, daß Adsorption nicht stattfindet.

Zwischen den Laplace-Transformierten 2.2(3), 2.3(2a) und 2.3(2b) bestätigt man mit Hilfe von 2.2(5) leicht die Beziehung

$$\psi_{k,N}(s/\lambda,\mu) = \psi_{k,N}^{(aa)}(s/\lambda,\mu) + \psi_{k,0}^{(aa)}(s/\lambda,\mu)\cdot\psi_{0,N}(s/\lambda,\mu) \quad (k=0,1,\dots,N-1). \qquad (6)$$

Im Originalraum entspricht ihr die in der Einleitung erwähnte Gleichung 1.1(11). Sie besagt, daß die Adsorption entweder mit oder ohne vorherige Berührung des reflektierenden Randes stattfindet. Setzt man nach KLINGER [18] die rechte Seite von (6) in die Rückwärtsgleichung 2.2(2b) ein, so liefert die Anfangsbedingung 2.2(2a) die Beziehung

$$\psi_{0,N}(s/\lambda,\mu) = \frac{\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,N}^{(aa)}(s)}{1-\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,0}^{(aa)}(s)}\,. \qquad (7)$$

Die Abschätzung

$$\left|\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,0}^{(aa)}(s)\right| \leq \psi_{1,0}^{(aa)}(0) = \begin{cases} \mu\cdot\dfrac{\lambda^{N-1}-\mu^{N-1}}{\lambda^N-\mu^N} < 1 & (\lambda\neq\mu,\ \mu\in[0,\infty)) \\ 1-\dfrac{1}{N} < 1 & (\lambda=\mu,\ \mu\in(0,\infty)) \end{cases} \qquad (\Re s \geq 0)$$

zeigt, daß in der Halbebene $\Re s \geq 0$ $\psi_{0,N}$ nach Potenzen von $\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,0}^{(aa)}$ geometrisch entwickelt werden kann, womit aus (6) folgt

$$\psi_{k,N}(s) = \psi_{k,N}^{(aa)}(s) + \psi_{k,0}^{(aa)}(s)\left\{\sum_{\nu=1}^{\infty}\left[\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,0}^{(aa)}(s)\right]^{\nu-1}\right\}\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,N}^{(aa)}(s)\,. \qquad (8)$$

Jedem Glied dieser unendlichen Reihe entspricht im Originalraum eine Faltung von überall nichtnegativen Funktionen, d. h. eine nichtnegative Funktion. Somit treffen die Voraussetzungen des Satzes 2.1.8 zu, der die Konvergenz der gliedweise rücktransformierten Reihe (8) gegen $\mathcal{L}^{-1}\{\psi_{k,N}(s)\} = p_{k,N}(t)$ sicherstellt. Nunmehr ist diese Reihe folgender Interpretation zugänglich:
Das ν-te Glied

$$\psi_{k,0}^{(aa)}(s)\left[\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,0}^{(aa)}(s)\right]^{\nu-1}\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,N}^{(aa)}(s)$$

korrespondiert mit der Wahrscheinlichkeitsdichte für das Ereignis, daß vor der zur Zeit t stattfindenden Adsorption der reflektierende Rand n = 0 genau ν-mal berührt wird. Das Anfangsglied $\psi_{k,N}^{(aa)}(s)$ ist dabei als nulltes Glied zu zählen. Im einzelnen entspricht der Faktor

$\psi_{k,0}^{(aa)}(s)$ erstmaliger Berührung des reflektierenden Randes,

$\left[\frac{\lambda}{s+\lambda}\cdot\psi_{1,0}^{(aa)}(s)\right]^{\nu-1}$ $(\nu-1)$-maligem Übergang nach n = 1 und $(\nu-1)$-maliger Rückkehr zum Rand (die Interpretation von $\frac{\lambda}{s+\lambda}$ ergibt sich am einfachsten aus Formel 2.2(6) für N - k = 1),

$\frac{\lambda}{s+\lambda}\,\psi_{1,N}^{(aa)}(s)$ letztmaligem Übergang vom Rand nach n = 1 und Übergang von n = 1 nach n = N.

Man könnte (8) die "Berührungsentwicklung der Adsorptionszeitverteilung" nennen. Die Berührungsentwicklung beim Prozeß mit zwei adsorbierenden Rändern bricht nach dem zweiten Glied ab, sie ist durch die rechte Seite von 1.1(10) gegeben.

4. Approximation der Adsorptionszeitverteilung für großes N.

Es liegt nahe, für großes N die Laplace-Transformierte $\psi_{k,N}(s)$ einem Grenzübergang $N\to\infty$ so zu unterwerfen, daß die Grenzfunktion Laplace-Transformierte einer Verteilungsdichte ist. Die Grenzverteilung kann dann als eine asymptotische Approximation von $p_{k,N}(t)$ für großes N gelten.

Satz 1: Gegeben seien

I. eine reelle Zahl $\xi \in [0,1)$ und zwei Folgen

$$\{k_m\} \text{ und } \{N_m\} \qquad (m = 1,2,\ldots) \tag{1a}$$

nichtnegativer ganzer Zahlen, so daß

$$N_m \geq 1 \text{ und } \frac{k_m}{N_m} < 1 \text{ für jedes } m,$$

$$\lim_{m\to\infty} N_m = \infty, \qquad \lim_{m\to\infty} \frac{k_m}{N_m} = \xi; \tag{1b}$$

II. zwei reelle Zahlen $\mu_1 \in (-\infty,\infty)$ und $\mu_2 \in (0,\infty)$ und zwei Folgen

$$\{\lambda^{(m)}\} \text{ und } \{\mu^{(m)}\} \qquad (m=1,2,\ldots) \tag{2}$$

nichtnegativer reeller Zahlen, so daß

$$\lambda^{(m)} \mu^{(m)} > 0 \text{ für fast alle } m,$$

$$\mu_{1,N_m} = \frac{\lambda^{(m)} - \mu^{(m)}}{N_m} \xrightarrow[m\to\infty]{} \mu_1, \qquad \mu_{2,N_m} = \frac{\lambda^{(m)} + \mu^{(m)}}{N_m^2} \xrightarrow[m\to\infty]{} \mu_2. \tag{3}$$

Dann konvergiert die Folge der Verteilungsfunktionen

$$\mathcal{P}_1 = \left\{ P_{k_m, N_m}(t/\lambda^{(m)}, \mu^{(m)}) \right\} \qquad (m = 1,2,\cdots),$$

die den Folgen k_m, N_m, $\lambda^{(m)}$ und $\mu^{(m)}$ zugeordnet ist, für $m \to \infty$ gegen eine absolut stetige Verteilungsfunktion, deren Dichte die Laplace-Transformierte

$$\psi(s/\mu_1,\mu_2;\xi) = e^{(1-\xi)\gamma\left(\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}+\gamma\right)} \frac{e^{\xi\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}} + \left(\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}-\gamma\right) e^{-\xi\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}}}{\left(\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}+\gamma\right) e^{\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}} + \left(\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}-\gamma\right) e^{-\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}}} \tag{4}$$

$$= \lim_{m\to\infty} \psi_{k_m, N_m}(s/\lambda^{(m)}, \mu^{(m)})$$

$\left(\beta = \sqrt{\frac{2}{\mu_2}},\ \gamma = \frac{\mu_1}{\mu_2}\right)$ besitzt. Wir bezeichnen Verteilungsfunktion und Dichte der Grenzverteilung mit $P(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ bzw. $p(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$.

μ_1 und μ_2 sind durch (3) als Grenzwerte der durch die Folgen (2) bestimmten normierten differentialen Momente definiert. Nach der in der Einleitung gegebenen Deutung ist für den Grenzprozeß μ_1 der Erwartungswert der mittleren Geschwindigkeit, mit der innerhalb

kleiner Zeiten die Zustände im Innern des Zustandsbereiches durchlaufen werden, und μ_2 die innerhalb kleiner Zeiten auf die Zeiteinheit entfallende Varianz des Endzustandes um den Anfangszustand.

Der Satz wird in folgenden Schritten bewiesen:

a) Die Folge der den Laplace-Integralen $\psi_{k_m,\, N_m}(s/\lambda^{(m)}, \mu^{(m)})$ zugeordneten Konvergenzabszissen hat eine negative obere Schranke $x_0 < 0$.

b) Die Folge $\{\psi_{k_m,\, N_m}(s/\lambda^{(m)}\mu^{(m)})\}$ konvergiert in einer Halbebene $\Re s \geq x'_0 > x_0$ mit $x'_0 < 0$ gegen die durch (4) gegebene Grenzfunktion $\psi(s/\mu_1, \mu_2; \xi)$, die dort Laplace-Transformierte ist.

Der Beweis des Satzes ergibt sich dann aus Satz 2.1.5 unmittelbar.

Zu a): Wir bestimmen allgemein eine obere Schranke für die Konvergenzabszisse des Laplace-Integrals $\psi_{k,\, N}(s/\lambda, \mu)$. Da dieses nach Satz 2.2.1 in der Konvergenzhalbebene eine gebrochen rationale Funktion darstellt, ist die Konvergenzabszisse gleich dem algebraisch größten Realteil der sämtlichen Polstellen von $\psi^*_{k,\, N}$. Wir schätzen daher die Polstellen ab - genauer: die Stellen, die überhaupt Polstellen sein können. Nach 2.2(3) sind dies die Wurzeln von

$$w_2^{r+1}(s) - w_1^{r+1}(s) - \frac{\mu}{\lambda}\left[w_2^r(s) - w_1^r(s)\right] = 0 \qquad (5)$$

(für $r = N$), die wir für $r = 1, 2, \ldots$ untersuchen wollen.

Der Fall $\mu = 0$. Gleichung (5) nimmt die einfachere Gestalt

$$w_2^{r+1} - w_1^{r+1} = 0 \qquad (6)$$

an. Aufgrund von 2.2(7) hat diese Gleichung die $(r+1)$-fache Wurzel

$$s_1 = \ldots = s_{r+1} = -\lambda \quad (\mu = 0). \qquad (7)$$

Weitere Wurzeln gibt es nicht.

Aus den im Satz 1 unter II. formulierten Voraussetzungen ergibt sich $\mu^{(m)} \neq 0$ für fastalle m, weshalb wir auf den Fall $\mu = 0$ nicht zurückzukommen brauchen.

Der Fall $\mu > 0$. Aufgrund von 2.2 (13) beherrschen wir die Polstellen von $\psi^*_{k,N}$, wenn wir die Wurzeln von

$$g_r(s') = 0 \qquad (r = 0,1,2,\ldots) \tag{8}$$

kennen. Aus 2.2 (14) finden wir mit Hilfe von 2.2 (11)

$$g_1(s') = s' - q\,, \tag{9}$$

$$g_2(s') = s'^2 - qs' - 1\,. \tag{10}$$

Wir zeigen durch vollständige Induktion, daß die Gleichung (8) für jedes r die Säkulargleichung zu einer reellen symmetrischen Matrix ist. Für ihre r Wurzeln folgt dann, daß sie sämtlich reell sind, und dasselbe gilt aufgrund von 2.2 (8) für die Polstellen von $\psi^*_{k,N}$ in der s-Ebene. Ihre Anzahl ist höchstens gleich N.

Für r = 1 ist die Behauptung richtig, denn es ist nach (9)

$$g_1(s') = |s' - q|\,.$$

Im Fall r = 2 stimmt

$$g_2(s') = \begin{vmatrix} s' & 1 \\ 1 & s'-q \end{vmatrix}$$

mit (10) überein, und allgemein muß gelten

$$g_r(s') = \begin{vmatrix} s' & 1 & & & & & \\ 1 & s' & 1 & & 0 & & \\ & 1 & s' & 1 & & & \\ & & 1 & s' & 1 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & & 1 & s' & 1 \\ & & & & & 1 & s'-q \end{vmatrix}, \qquad (11)$$

weil die Entwicklung dieser r-reihigen Determinante nach der ersten Zeile mit der Funktionalgleichung 2.2(15) übereinstimmt.

Der Rang der r-reihigen Determinante (11) ist für jedes s' mindestens gleich r - 1. Wäre er für ein s' kleiner, so müßte mit $g_r(s') = 0$ zugleich $g_{r-1}(s') = 0$ sein, und aus der Funktionalgleichung 2.2(15) würde folgen $g_j(s') = 0$ für alle j. s' müßte dann notwendig mit der Nullstelle $s' = q$ von $g_1(s')$ übereinstimmen. Aber $g_2(q)$ ist ungleich Null, und das beweist die Behauptung. Aus ihr folgt, daß alle Nullstellen von $g_r(s')$ $(r = 1, 2, \ldots)$ einfach sind. Alle Pole von $\psi^*_{k,N}$ sind somit von erster Ordnung.

Wir benennen nun die r Nullstellen von $g_r(s')$ mit $s'_1, \ldots, s'_r$, die ihnen gemäß 2.2(8) zugeordneten Werte der s-Ebene mit $s_1, \ldots, s_r$ und wissen, daß diese reellen Zahlen die sämtlichen Polstellen von $\psi^*_{k,r}(s)$ $(k \in \{0, 1, \ldots, r-1\})$ enthalten, und zwar auch ihrer Vielfachheit nach. Wir zeigen nun, daß die Numerierung so gewählt werden kann, daß

α) im Fall $\sqrt{\frac{\mu}{\lambda}} \in (0, 1+\frac{1}{r})$:

$$-(\sqrt{\lambda}+\sqrt{\mu})^2 < s_j < -(\sqrt{\lambda}-\sqrt{\mu})^2 \quad (j=1,2,\dots,r) \tag{12}$$

β) im Fall $\sqrt{\frac{\mu}{\lambda}} = 1+\frac{1}{r}$:

$$s_1 = -(\sqrt{\lambda}-\sqrt{\mu})^2, \tag{13}$$

$$-(\sqrt{\lambda}+\sqrt{\mu})^2 < s_j < -(\sqrt{\lambda}-\sqrt{\mu})^2 \quad (j=2,\dots,r) \tag{14}$$

γ) im Fall $\sqrt{\frac{\mu}{\lambda}} \in (1+\frac{1}{r}, \infty)$:

$$-(\sqrt{\lambda}-\sqrt{\mu})^2 < s_1 < 0, \tag{15}$$

$$-(\sqrt{\lambda}+\sqrt{\mu})^2 < s_j < -(\sqrt{\lambda}-\sqrt{\mu})^2 \quad (j=2,\dots,r). \tag{16}$$

Vor dem eigentlichen Beweis führen wir zunächst Polynome $f_r(\nu)$ ein, deren Wurzeln mit den Wurzeln der Polynome $g_r(s')$ in einfacher Weise zusammenhängen. Nach 2.2 (3) müssen die Polstellen von $\psi^*_{k,N}$ wegen $w_1=\frac{q^2}{w_2}$ neben $g_N(s')=0$ auch der Gleichung

$$w_2^{2r+2} - q^2 w_2^{2r+1} + q^{2r+2} w_2 - q^2 = 0 \tag{17}$$

(mit $r = N$) genügen. Setzen wir

$$\nu_1(s) = \sqrt{\frac{\lambda}{\mu}}\, w_1(s) = \frac{s+\lambda+\mu}{2\sqrt{\lambda\mu}} - \sqrt{\frac{(s+\lambda+\mu)^2}{4\lambda\mu}-1} = \frac{s'(s)}{2} - \sqrt{\frac{s'^2(s)}{4}-1},$$
$$\nu_2(s) = \sqrt{\frac{\lambda}{\mu}}\, w_2(s) = \frac{s+\lambda+\mu}{2\sqrt{\lambda\mu}} + \sqrt{\frac{(s+\lambda+\mu)^2}{4\lambda\mu}-1} = \frac{s'(s)}{2} + \sqrt{\frac{s'^2(s)}{4}-1} \tag{18}$$

(vgl.2.2(8)), so gilt die Gleichung

$$\nu_1(s)\nu_2(s) = 1 \qquad (s \text{ beliebig komplex}). \tag{19}$$

Mit ihr findet man aus (17), daß jedes $\eta = \nu_2(s)$ mit einem (17) genügenden s Wurzel der Gleichung

$$\nu^{2r+2} - q\nu^{2r+1} + q\nu - 1 = 0 \tag{20}$$

ist. Da diese Gleichung reziprok ist, hat sie mit η auch $\frac{1}{\eta}$, nach (19) also mit $\nu_2(s)$ auch $\nu_1(s)$ zur Wurzel. Der aus (18) folgenden Beziehung

$$s'(s) = \nu_2(s) + \nu_1(s)$$
$$= \nu_2(s) + \frac{1}{\nu_2(s)}$$

können wir nun entnehmen, daß wir jede Wurzel von $g_r(s') = 0$ aus einer passenden Wurzel ν^* von (20) erhalten, indem wir setzen

$$s' = \nu^* + \frac{1}{\nu^*}. \tag{21}$$

Aufgrund dieser Beziehung werden wir die Polstellendiskussion auf Gleichung (20) gründen. Offenbar dürfen wir diejenigen Wurzeln außer acht lassen, die weder ihrem Wert noch ihrer Vielfachheit nach von r abhängen, wie z.B. die stets einfache Wurzel

$$v = -1 \quad \text{(einfach)}. \tag{22}$$

Man überlegt sich anhand von 2.2(3) ferner leicht, daß die Wurzel

$$v = +1 \ \begin{cases} \text{(einfach, falls } q \neq 1 + \frac{1}{r}\text{,} \\ \text{dreifach, falls } q = 1 + \frac{1}{r}\text{)} \end{cases} \tag{23}$$

nur zweifach als Polstelle auftreten kann. Somit dürfen wir von (20) das Polynom v^2-1 abspalten, womit wir die reziproke Gleichung

$$f_r(v) = 1 + \sum_{\nu=1}^{r} (v^{2\nu} - q v^{2\nu-1}) = 0 \tag{24}$$

erhalten, deren sämtliche $2r$ Wurzeln aufgrund von (21) die sämtlichen r Wurzeln von $g_r(s') = 0$ bestimmen. Da die letzteren reell sind, müssen alle nichtreellen Wurzeln von (24) wegen (21) von der Form $v^* = e^{i\vartheta}$ $\quad (\vartheta \text{ reell};\ q \in (0,\infty))$ sein. Wir entnehmen aus (24) ferner

$$f_r(v) \neq 0 \quad (-\infty < v < 0), \qquad f_r(0) = f_r(q) = 1. \tag{25}$$

Wir beweisen nun unsere Behauptung über die Lage der Nullstellen von $g_r(s')$. Wir ordnen die sämtlichen nicht identisch verschwindenden Ableitungen $f_r^{(\varkappa)}(v)$ des über der v-Ebene erklärten Polynoms $f_r(v)$ einschl.der nullten Ableitung in natürlicher Reihenfolge aneinander:

$$\left.\begin{aligned} f_r(v) &= 1 + \sum_{\nu=1}^{r} (v^{2\nu} - q\, v^{2\nu-1}), \\ f_r^{(\varkappa)}(v) &= \sum_{\nu=\left[\frac{\varkappa+1}{2}\right]}^{r} \frac{(2\nu)!}{(2\nu-\varkappa)!}\left(v^{2\nu-\varkappa} - q\left(1-\frac{\varkappa}{2\nu}\right)v^{2\nu-\varkappa-1}\right) \\ &\qquad (\varkappa = 1, \ldots, 2r). \end{aligned}\right\} \tag{26}$$

und benutzen folgenden

Hilfssatz (PERRON [20], Satz 10 S. 15): Sei $h(x)$ ein Polynom n-ten Grades mit reellen Koeffizienten und seien a, b zwei reelle Zahlen, so daß $a < b$ und daß $h(a) \neq 0$, $h(b) \neq 0$ ist. Bezeichnet man dann mit m_a bzw. m_b die Anzahl der Zeichenwechsel in der Reihe der Ableitungen

$$h(x),\ h'(x),\ \ldots,\ h^{(n)}(x),$$

wenn man x durch a bzw. b ersetzt, so ist $m_a \geq m_b$, und die Anzahl der zwischen a und b liegenden Wurzeln von $h(x)$ ist entweder gleich $m_a - m_b$ oder um eine gerade Zahl kleiner. Dabei ist jede Wurzel ihrer Vielfachheit entsprechend zu zählen.

Nach (25) dürfen wir den Hilfssatz für a = q anwenden. Für v = q wird die Reihe (26) offenbar

$$f_r(q) = 1,\quad f_r^{(\varkappa)}(q) = \sum_{\nu=\left[\frac{\varkappa+1}{2}\right]}^{r} \frac{(2\nu-1)!}{(2\nu-\varkappa)!}\,\varkappa\, q^{2\nu-\varkappa}, \tag{27}$$

sie hat also $m_a = 0$ Vorzeichenwechsel, woraus folgt

$$f_r(v) \neq 0 \quad (q \leq v < +\infty\ ; \quad q \in (0, +\infty)). \tag{28}$$

Weil mit v auch $\frac{1}{v}$ Nullstelle von f_r ist, muß mit (28) auch

$$f_r(v) \neq 0 \quad (0 < v \leq \tfrac{1}{q}; \qquad q \in (0, \infty)) \tag{29}$$

gelten. Aus (28) und (29) folgt

$$f_r(v) \neq 0 \quad (0 < v < +\infty; \quad q \in (0,1]\ ),$$

so daß insgesamt

$$f_r(v) \neq 0 \quad (-\infty < v < +\infty; \quad q \in (0,1]\ ). \tag{30}$$

Für $q \in (1, +\infty)$ kann somit die Gleichung $f_r(v) = 0$ höchstens für reelles v und dann höchstens für

$$v \in (\tfrac{1}{q},\ q) \tag{31}$$

bestehen. Es genügt offenbar, nur das Intervall

$$1 \leq v < q \tag{32}$$

auf Nullstellen zu untersuchen. Deshalb setzen wir a = 1, b = q und stellen fest, daß mit (25) die Voraussetzung des Hilfssatzes bezüglich b erfüllt ist. Bezüglich a haben wir nach (26) die Bedingung

$$f_r(1) = 1 + \sum_{\nu=1}^{r} (1-q) = 1 + r\,(1-q) \neq 0$$

zu stellen:

$$q \neq 1 + \frac{1}{r} \cdot \tag{33}$$

Aus (26) finden wir nun für $\nu = 1$ die Reihe

$$\left.\begin{aligned} f_r(1) &= 1 + r\,(1-q) \\ &= r\left[1 - q\left(1 - \frac{1}{rq}\right)\right], \\ f_r^{(\varkappa)}(1) &= \sum_{\nu=\left[\frac{\varkappa+1}{2}\right]}^{r} \frac{(2\nu)!}{(2\nu-\varkappa)!}\left[1 - q\left(1 - \frac{\varkappa}{2\nu}\right)\right] \quad (\varkappa = 1, \ldots, 2r) \end{aligned}\right\} \tag{34}$$

und müssen wegen (33) die Fälle

1) $q \in (1,\ 1 + \frac{1}{r})$, 2) $q \in (1 + \frac{1}{r},\ \infty)$

unterscheiden.

Im ersten Fall ist $f_r(1) > 0$ und $rq > \frac{\varkappa}{2\nu}$ für alle $\varkappa$ und ν, folglich auch $f_r^{(\varkappa)}(1) > 0$. Die Reihe hat demnach $m_a = 0$ Zeichenwechsel, woraus folgt, daß es im Intervall (32) und damit im ganzen Intervall (31) keine Nullstelle gibt:

$$f_r(v) \neq 0 \quad \left(\frac{1}{q} < v < q\ ;\ q \in (1,\ 1 + \frac{1}{r})\right).$$

Zusammen mit Ungleichung (30) und aufgrund der darauffolgenden Bemerkung haben wir bewiesen:

$$f_r(v) \neq 0 \quad (-\infty < v < +\infty\ ;\quad q \in (0,\ 1 + \frac{1}{r})).$$

Für $q \notin (0,\ 1 + \frac{1}{r})$ sind demnach die sämtlichen 2 r Nullstellen von $f_r(v)$ komplex, was nach (18), da die Polstellen $s = s_1, \ldots, s_r$ reell sind, nur möglich ist, wenn der dort auftretende Radikand negativ reell ist, d. h. wenn die Ungleichungen (12) bestehen. Die Behauptung α) ist damit bewiesen.

Um die Behauptung γ) zu beweisen, diskutieren wir den obigen Fall 2), d.h. das Verhalten von $f_r(v)$ für $q \in (1 + \frac{1}{r}, \infty)$. Es ist dann in der Reihe (34) $f_r(1) < 0$, und da das letzte Reihenglied $f_r^{(2r)}(1) = (2r)!$ positiv ist, gibt es eine ungerade Anzahl m_a von Zeichenwechseln, so daß wir

nach dem Hilfssatz die Reihe $f_r^{(\infty)}(b) = f_r^{(\infty)}(q)$ hinzuziehen müssen, von der wir bereits wissen (vgl. (27)), daß sie $m_b = 0$ Zeichenwechsel hat. Somit gibt es im Intervall (32) entweder $m_a - m_b = m_a$ Nullstellen oder eine Anzahl, die sich von dieser ungeraden Zahl um eine gerade Zahl unterscheidet. Es gibt also mindestens eine Nullstelle im Intervall $1 \leq \nu < q$. Bezeichnen wir die Anzahl der im ganzen Intervall $\frac{1}{q} < \nu < q$ gelegenen Nullstellen mit ϱ, so folgt

$$\varrho \in \{2, 4, \ldots, 2r\} . \tag{35}$$

Dies gilt sogar für

$$q \in \left[1 + \frac{1}{r}, \infty\right), \tag{36}$$

denn wir wissen von (23), daß im Fall $q = 1 + \frac{1}{r}$ das Polynom $f_r(v)$ noch zweimal die Nullstelle $1 \in (\frac{1}{q}, q)$ enthält. Wir wenden nun auf das durch (20) gegebene Polynom $(v - 1)(v + 1) f_r(v)$ die Descartes'sche Vorzeichenregel an, nach der es entweder 3 oder 1 positive Wurzeln hat. Folglich hat $f_r(v)$ entweder 2 oder 0 positive Wurzeln, und da wir wissen, daß diese im Intervall $\frac{1}{q} < \nu < q$ liegen müssen, haben wir

$$\varrho \in \{0, 2\} .$$

Mit (35) folgt daraus, daß unter der Voraussetzung (36) genau $\varrho = 2$ Nullstellen im Intervall $(\frac{1}{q} < v < q)$ vorhanden sind. Sie müssen (für $s = s_1$) die Ungleichungen

$$1 \leq \nu_2(s_1) < \sqrt{\frac{\mu}{\lambda}}, \qquad \sqrt{\frac{\lambda}{\mu}} < \nu_1(s_1) \leq 1$$

erfüllen, aus denen im Fall $\sqrt{\frac{\mu}{\lambda}} = 1 + \frac{1}{r}$, wo die Gleichheitszeichen gelten, die Beziehung (13), für $\sqrt{\frac{\mu}{\lambda}} \in (1 + \frac{1}{r}, \infty)$ (15) folgt. Die übrigen $2r-2$ komplexen Wurzeln von $f_r(v) = 0$ führen wieder auf die Ungleichungen (12) für die Zahlen $s_2, \ldots, s_r$ (vgl. (14) und (16)).

Damit sind auch die Fälle $\beta)$ und $\gamma)$ bewiesen.

Wir schließen nun den Beweis der Behauptung a) zum Satz 1 ab mit der Untersuchung der Folge $\psi^*_{k_m,\,N_m}$.
Aus (3) folgt

$$2\lambda^{(m)} = N_m^2\mu_{2,N_m} + N_m\mu_{1,N_m}\,, \qquad 2\mu^{(m)} = N_m^2\mu_{2,N_m} - N_m\mu_{1,N_m}\,, \tag{37a}$$

$$2\sqrt{\lambda^{(m)}\mu^{(m)}} = N_m^2\mu_{2,N_m}\sqrt{1-\frac{\mu_{1,N_m}^2}{N_m^2\mu_{2,N_m}^2}}\,, \quad q^{(m)} = \sqrt{\frac{\mu^{(m)}}{\lambda^{(m)}}} = \left(1-\frac{\mu_{1,N_m}}{N_m\mu_{2,N_m}}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1+\frac{\mu_{1,N_m}}{N_m\mu_{2,N_m}}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

und weiter

$$\lim_{m\to\infty}\left[-\left(\sqrt{\lambda^{(m)}}-\sqrt{\mu^{(m)}}\right)^2\right] = -\frac{\mu_1^2}{2\mu_2}\,. \tag{37b}$$

Ferner ist

$$q^{(m)} = 1 - \frac{\mu_{1,N_m}}{N_m\mu_{2,N_m}} + O\left(\frac{1}{N_m^2}\right),$$

so daß die Fallunterscheidungen $\alpha)$, $\beta)$, $\gamma)$ (vgl.S.25), d. h. die Beziehungen

$$q^{(m)} < 1+\frac{1}{N_m}\,, \quad q^{(m)} = 1+\frac{1}{N_m}\,, \quad q^{(m)} > 1+\frac{1}{N_m}\,,$$

in die Gestalt

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mu_{1,N_m}}{\mu_{2,N_m}} &> -1+G\left(\frac{1}{N_m}\right) \qquad (\text{Fall } \alpha)) \\ \frac{\mu_{1,N_m}}{\mu_{2,N_m}} &= -1+G\left(\frac{1}{N_m}\right) \qquad (\text{Fall } \beta)) \\ \frac{\mu_{1,N_m}}{\mu_{2,N_m}} &< -1+G\left(\frac{1}{N_m}\right) \qquad (\text{Fall } \gamma)) \end{aligned}\right\} \tag{37c}$$

gebracht werden können. Dabei ist G die Funktion

$$G\left(\frac{1}{N}\right) = \frac{1}{N}\cdot\frac{1+\frac{1}{N}}{1+\left(1+\frac{1}{N}\right)^2}\,,$$

die sich für $N \longrightarrow \infty$ wie $\frac{1}{2N}$ verhält.

Jede mit einem vorgegebenen zulässigen Zahlenpaar μ_1, μ_2 verträgliche Folge $\{\psi_{k_m, N_m}\}$ läßt sich in drei Teilfolgen so zerlegen, daß eine Teilfolge genau die dem Fall $\alpha)$ bzw. $\beta)$ bzw. $\gamma)$ untergeordneten Elemente enthält, wobei bis zu zwei dieser Teilfolgen auch leer sein können. Eine Folge nennen wir α-Folge, β-Folge, γ-Folge, wenn alle ihre Elemente dem Fall $\alpha)$ bzw. $\beta)$ bzw. $\gamma)$ entsprechen; ohne Bezug auf einen bestimmten Fall sprechen wir auch von reinen Folgen.

Es genügt zu zeigen, daß die Konvergenzabszissen zu jeder reinen Folge nach oben negativ beschränkt sind, weil sich jede Folge in drei reine Teilfolgen zerlegen läßt. Dabei können wir uns auf unendliche reine Folgen beschränken. Zuvor ist zu klären, durch welche reine Folgen ein Wertepaar μ_1, μ_2 realisierbar ist.

Für $\frac{\mu_1}{\mu_2} \in (-\infty, -1)$ gibt es ein $\delta > 0$, so daß $\frac{\mu_1}{\mu_2} < -1 - \delta$. Folglich muß für eine reine Folge die dritte Ungleichung (37c) für alle m erfüllt sein. Für $\frac{\mu_1}{\mu_2} \in (-1, \infty)$ muß dagegen die erste Ungleichung (37c) für alle m gelten. Schließlich erkennt man, daß für $\frac{\mu_1}{\mu_2} = -1$ jede der Beziehungen (37c) für alle m erfüllt sein kann. Insgesamt ergibt sich:

Der Bereich für $\frac{\mu_1}{\mu_2}$	ist zu diskutieren für reine Folgen vom Typ
$(-\infty, -1)$	γ
-1	α, β, γ
$(-1, \infty)$	α

Der Fall $\frac{\mu_1}{\mu_2} \in (-\infty, -1]$. Für α- oder β-Folgen mit $\frac{\mu_1}{\mu_2} = -1$ folgt aus (37b) in Verbindung mit (12) bzw. (13), daß fast alle Konvergenzabszissen kleiner als z. B. die negative Zahl $-\frac{\mu_1^2}{4\mu_2}$ sind.

Für γ-Folgen mit $\frac{\mu_1}{\mu_2} \in (-\infty, -1]$ können wir aus (15) nur die zu schwache Abschätzung 0 für die Folge der Konvergenzabszissen entnehmen. Wir wissen, daß für die Polstelle

$$s_1^{(m)} = -\lambda^{(m)} - \mu^{(m)} + \sqrt{\lambda^{(m)}\mu^{(m)}}\left(\nu^{(m)} + \frac{1}{\nu^{(m)}}\right) \tag{38a}$$

(vgl. (21) und 2.2 (8)) die Zahl $\nu^{(m)}$ durch eine der beiden positiven Nullstellen der Funktion

$$f_{N_m}(\nu) = 1 + \sum_{\nu=1}^{N_m}\left(\nu^{2\nu} - q^{(m)}\nu^{2\nu-1}\right)$$

$$= 1 - \nu\left(q^{(m)} - \nu\right)\frac{\nu^{2N_m} - 1}{\nu^2 - 1} \tag{38b}$$

gegeben ist. Wir verschärfen nun die für $\nu^{(m)}$ bewiesene Abschätzung $\nu^{(m)} \in (1, q^{(m)})$ wie folgt: Es gibt ein von $\frac{\mu_1}{\mu_2}$ abhängiges $c_0 \in (0,2)$, so daß für fast alle m

$$\nu^{(m)} \in \left(1, q^{(m)}\left(1 - \frac{c_0}{N_m}\right)\right). \tag{38c}$$

Wir gehen davon aus, daß

$$f_{N_m}(1) = 1 + N_m(1 - q^{(m)}) \leq 0, \quad f_{N_m}(q^{(m)}) = 1 > 0,$$

so daß wir nur

$$\lim_{m\to\infty} f_{N_m}\left(q^{(m)}\left(1 - \frac{c_0}{N_m}\right)\right) > 0$$

zu beweisen brauchen.

Wir setzen

$$\nu = z_m = q^{(m)}\left(1 - \frac{c}{N_m}\right), \qquad q^{(m)} - z_m = \frac{cq^{(m)}}{N_m}$$

in (38b) ein und erhalten

$$f_{N_m}(z_m) = 1 - \frac{cq^{(m)}z_m}{N_m}\,\frac{z_m^{2N_m} - 1}{z_m^2 - 1}\,.$$

Weiter gilt mit der Abkürzung $\gamma = \frac{\mu_1}{\mu_2}$ mit Hilfe von (37a)

$$\lim_{m\to\infty} N_m(z_m^2 - 1) = 2\left(|\gamma| - c\right),$$

$$\lim_{m\to\infty} z_m^{2N_m} = \lim_{m\to\infty}\left[q^{(m)}\right]^{2N_m}\left(1 - \frac{c}{N_m}\right)^{2N_m}$$

$$= e^{2(|\gamma| - c)},$$

folglich

$$\lim_{m\to\infty} f_{N_m}(z_m) = 1 - \frac{e^{z(|\gamma|-c)}-1}{2\left(\frac{|\gamma|}{c}-1\right)} \in (0,1),$$

falls $c = c_0 \in (0,2)$ klein genug gewählt wird. Die so bewiesene Abschätzung (38c) ermöglicht nun eine brauchbare Abschätzung von (38a) für fast alle m (vgl.auch (15)):

$$-\left(\sqrt{\lambda^{(m)}}-\sqrt{\mu^{(m)}}\right)^2 < s_1^{(m)} < -\lambda^{(m)}-\mu^{(m)}+\sqrt{\lambda^{(m)}\mu^{(m)}}\left[q^{(m)}\left(1-\frac{c_0}{N_m}\right)+\frac{1}{q^{(m)}}\left(1-\frac{c_0}{N_m}\right)^{-1}\right]$$

$$< -\lambda^{(m)}-\mu^{(m)}+\mu^{(m)}\left(1-\frac{c_0}{N_m}\right)+\lambda^{(m)}\left(1-\frac{c_0}{N_m}\right)^{-1}$$

$$< -\lambda^{(m)}-c_0\frac{\mu^{(m)}}{N_m}+\lambda^{(m)}\left(1+\frac{c_0}{N_m}+\frac{c_0^2}{N_m^2}+O\left(\frac{1}{N_m^3}\right)\right)$$

$$< c_0\,\mu_{1,N_m}+\frac{c_0^2}{2}\,\mu_{2,N_m}+O\left(\frac{1}{N_m}\right).$$

Mit (37b) folgen hieraus die Ungleichungen

$$-\frac{\mu_1^2}{2\mu_2} \le \limsup_{m\to\infty} s_1^{(m)} \le c_0\mu_1+\frac{c_0^2}{2}\mu_2,$$

die nur bestehen können, falls c_0 die Ungleichung

$$-\frac{\mu_1^2}{\mu_2^2} \le 2c_0\frac{\mu_1}{\mu_2}+c_0^2, \quad \text{d.h. } (c_0+\gamma)^2 \ge 0$$

erfüllt, was sicherlich zutrifft. Wegen $c_0 \in (0,2)$ gilt weiter

$$\mu_1+\frac{c_0}{2}\mu_2 < \mu_1+\mu_2 \le 0,$$

so daß

$$\limsup_{m\to\infty} s_1^{(m)} < 0.$$

Damit ist die Existenz einer negativen oberen Schranke für die Folge der Konvergenzabszissen erwiesen.

Der Fall $\frac{\mu_1}{\mu_2} \in (-1, \infty)$. Aus (37b) in Verbindung mit (12) folgt für jede α-Folge, daß fast alle Konvergenzabszissen kleiner als z. B. $-\frac{\mu_1^2}{4\mu_2}$ sind, so daß für $\frac{\mu_1}{\mu_2} \neq 0$ die Folge der Konvergenzabszissen negativ beschränkt ist.

Für $\mu_1 = 0$ versagt diese Schlußweise. Wir betrachten aus der Menge der zulässigen α-Folgen zunächst nur diejenigen mit $\lambda^{(m)} = \mu^{(m)}$ für fast alle m. Dann ist $q^{(m)} = 1$ für fast alle m und für diese m die Gleichung (24) (für $v' = -v$) Kreisteilungsgleichung mit den Wurzeln

$$\nu_j^{(m)} = e^{\frac{2j-1}{2N_m+1}\pi i} \qquad (j = -N_m+1, -N_m+2, \ldots, N_m-1, N_m),$$

so daß $s_j'^{(m)} = \nu_j^{(m)} + \frac{1}{\nu_j^{(m)}} = 2\cos\frac{(2j-1)\pi}{2N_m+1}$

Mit Hilfe von 2.2(8)) folgt durch Entwicklung des cos weiter

$$s_j^{(m)} = N_m^2 \mu_{2,N_m}\left[1 - \frac{(2j-1)^2\pi^2}{2(2N_m+1)^2} + \ldots\right] - N_m^2 \mu_{2,N_m}$$

und

$$\lim_{m\to\infty} s_j^{(m)} = -\frac{\mu_2}{2}\left(j-\frac{1}{2}\right)^2\pi^2 < 0 \qquad (j = 1, 2, \ldots), \quad (39)$$

woraus die Existenz einer negativen oberen Schranke für die Folge der Konvergenzabszissen folgt.

Damit ist die Behauptung a) zum Satz 1 für alle $\frac{\mu_1}{\mu_2} \neq 0$ und für spezielle α-Folgen auch für $\frac{\mu_1}{\mu_2} = 0$ bewiesen. Für beliebige α-Folgen mit $\frac{\mu_1}{\mu_2} = 0$ werden wir zeigen, daß

$$\lim_{m\to\infty} \psi_{k_m, N_m}(s/\lambda^{(m)}, \mu^{(m)})$$

in einer reellen echten Umgebung des Nullpunktes der s-Ebene existiert und dort beschränkt ist, was nur möglich ist, wenn die Folge der Konvergenzabszissen negativ beschränkt ist. Da wir für beliebiges $\frac{\mu_1}{\mu_2}$ diesen Grenzwert zum Beweis der Behauptung b) zum Satz 1 benötigen, wenden wir uns zunächst dieser Behauptung zu.

Zu b): Wir bestimmen $\lim_{m\to\infty} g_{N_m}(s'^{(m)})$, indem wir zunächst einen Ausdruck für $g_r(s')$ als Lösung der linearen homogenen Differenzengleichung zweiter Ordnung 2.2(15) mit konstanten Koeffizienten und den Anfangsbedingungen (9), (10) ermitteln:

$$g_r(s') = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\frac{s'}{2} - q}{\sqrt{\frac{s'^2}{4} - 1}}\right)\left(\frac{s'}{2} + \sqrt{\frac{s'^2}{4} - 1}\right)^r + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\frac{s'}{2} - q}{\sqrt{\frac{s'^2}{4} - 1}}\right)\left(\frac{s'}{2} - \sqrt{\frac{s'^2}{4} - 1}\right)^r$$

und

$$r = N_m, \quad q = q^{(m)}, \quad s' = s'^{(m)} = \frac{s + \lambda^{(m)} + \mu^{(m)}}{\sqrt{\lambda^{(m)}\,\mu^{(m)}}}$$

setzen. Dann finden wir mit Hilfe von (37a) und den Abkürzungen $\gamma = \frac{\mu_1}{\mu_2}$, $\beta = \sqrt{\frac{2}{\mu_2}}$

$$\lim_{m\to\infty} \frac{\frac{s'^{(m)}}{2} - q^{(m)}}{\sqrt{\frac{s'^{(m)2}}{4} - 1}} = \frac{\gamma}{\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}},$$

$$\lim_{m\to\infty} \left(\frac{s'^{(m)}}{2} \pm \sqrt{\frac{s'^{(m)2}}{4} - 1}\right)^{N_m} = e^{\pm\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}},$$

$$\lim_{m\to\infty} g_{N_m}(s'^{(m)}) = \frac{\left(\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2} + \gamma\right) e^{\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}} + \left(\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2} - \gamma\right) e^{-\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}}}{2\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}}$$

$$\lim_{m\to\infty} g_{k_m}(s'^{(m)}) = \frac{\left(\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2} + \gamma\right) e^{\xi\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}} + \left(\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2} - \gamma\right) e^{-\xi\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}}}{2\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2}}$$

und mit Hilfe von

$$\lim \left[q^{(m)}\right]^{k_m - N_m} = \lim \left[q^{(m)}\right]^{-N_m(1-\xi)} = e^{(1-\xi)\gamma}$$

aufgrund von 2.2(13) schließlich die zu beweisende Grenzwertformel (4) für jedes komplexe s, für das der Nenner von (4) nicht verschwindet. Insbesondere ergibt

sich (4) für jede α-Folge mit $\lim_{m\to\infty} \mu_{1,N_m} = \mu_1 = 0$, und zwar in der einfachen Gestalt

$$\psi(s/0,\mu_2;\xi) = \frac{\mathfrak{Lof}(\xi\beta\sqrt{s})}{\mathfrak{Lof}(\beta\sqrt{s})}$$

$$= \frac{\cos(\xi\beta\sqrt{-x})}{\cos(\beta\sqrt{-x})} \qquad (s = x \text{ reell}).$$

Auf jedem abgeschlossenen Intervall $-a \le x \le 0$ mit $\alpha \in \left[0, \frac{\mu_2}{2}\frac{\pi^2}{4}\right)$ (vgl. hierzu (39) für $j = 1$) ist diese Funktion beschränkt, womit gezeigt ist, daß auch für beliebige α-Folgen mit $\mu_1 = 0$ die Folge der Konvergenzabszissen nach oben negativ beschränkt ist. Es existiert daher wie behauptet ein $x_0' < 0$ mit der Eigenschaft, daß der Grenzübergang für jedes $s \in \{\Re s \ge x_0'\}$ gilt. Aus der Holomorphie der ψ_{k_m, N_m} sowie der leicht zu zeigenden Gleichmäßigkeit der Konvergenz auf $\Re s = x_0'$ folgt die Holomorphie der Grenzfunktion in $\Re s > x_0'$.

Daß die Grenzfunktion $\psi(s)$ Laplace-Transformierte ist, beweisen wir durch Anwendung des Satzes 2.1.9. Sei mit den Abkürzungen $\alpha = \frac{\mu_1}{\sqrt{2\mu_2}}$ und $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{u^2}{2}}\, du$

$$f_1(t) = \frac{1-\xi}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\, t^{-3/2}\, e^{-\alpha^2 t - \frac{(1-\xi)^2}{2\mu_2 t}} \qquad (t > 0),$$

$$f_2(t) = 4\alpha^2 e^{(1+\xi)\alpha}\, \Phi\left(-\alpha\sqrt{2t} - \frac{1+\xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\, t^{-3/2} (1+\xi-2\mu_2 t)\, e^{-\alpha^2 t - \frac{(1+\xi)^2}{2\mu_2 t}} \qquad (t > 0)$$

und

$$h(z_1,z_2) = e^{(1-\xi)\gamma}\,\frac{z_1+z_2}{1+z_1z_2} \qquad (|z_1z_2|<1)$$

gesetzt. Dann ist für $\Re s \geq -\alpha^2$

$$\varphi_1(s) = L\{f_1\} = e^{-(1-\xi)\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}}$$

(DOETSCH [10], S. 105 Nr. 1 in Verbindung mit Satz 2.1.10),

$$\varphi_2(s) = L\{f_2\} = \frac{\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}-\gamma}{\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}+\gamma}\; e^{-(1+\xi)\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}}$$

(ERDELYI [11] S. 247 Nr. 15), und mit diesen Funktionen gilt

$$\psi(s/\mu_1,\mu_2;\xi) = h(\varphi_1,\varphi_2),$$

woraus die Behauptung folgt.

Damit ist der Satz bewiesen.

In folgenden (und auch im vierten Kapitel) benötigen wir die Formeln

$$\lim_{m\to\infty} N_m\left(w_2^{(m)} - \frac{\mu^{(m)}}{\lambda^{(m)}}\right) = \sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}+\gamma \tag{40}$$

$$\lim_{m\to\infty} N_m\left(\frac{\mu^{(m)}}{\lambda^{(m)}} - w_1^{(m)}\right) = \sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}-\gamma \tag{41}$$

$$\lim_{m\to\infty} \left[w_2^{(m)}\right]^{N_m} = e^{-\gamma+\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}} \tag{42}$$

$$\lim_{m\to\infty} \left(\frac{\mu^{(m)}}{\lambda^{(m)}}\right)^{N_m} = e^{-2\gamma} \tag{43}$$

$$\lim_{m\to\infty} \left[w_1^{(m)}\right]^{N_m} = e^{-\gamma-\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}} \tag{44}$$

$$\lim_{m\to\infty} N_m\left(1-\frac{\mu^{(m)}}{\lambda^{(m)}}\right) = 2\gamma. \tag{44a}$$

Aus ihnen läßt sich die Grenzwertformel (4) ohne Benutzung der Polynome $g_r(s'(s))$ ableiten, indem man von der aus 2.2(3) folgenden Formel

$$\psi_{k,N}(s/\lambda,\mu) = \frac{N\left(w_2-\frac{\mu}{\lambda}\right)w_2^k - N\left(w_1-\frac{\mu}{\lambda}\right)w_1^k}{N\left(w_2-\frac{\mu}{\lambda}\right)w_2^N - N\left(w_1-\frac{\mu}{\lambda}\right)w_1^N}$$

ausgeht.

Die Anwendung desselben Grenzübergangs auf den Prozeß

$$\psi_k^{(\cdot a)}(s/\lambda,\mu) = \frac{1}{w_2^{N-k}} \quad (k = N-1, N-2, \ldots, 1, 0, -1, \ldots)$$

(vgl. 2.3(3)) mit dem Zustandsbereich $\{\ldots,-1,0,1,\ldots,N\}$ führt nach (42) auf die Grenzfunktion

$$\psi^{(\cdot a)}(s/\mu_1,\mu_2;\xi) = e^{(1-\xi)(\gamma-\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2})} \qquad (\xi \in (-\infty, 1)). \tag{45}$$

Entsprechend 2.3(4) bestehen die Gleichungen

$$\psi^{(\cdot a)}(0/\mu_1,\mu_2;\xi) = \begin{cases} 1 & (\mu_1 \in [0,\infty)) \\ e^{2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}} \in (0,1) & (\mu_1 \in (-\infty,0)). \end{cases} \tag{46}$$

Im Originalraum entspricht ihr für $0 < t < \infty$ die Verteilungsfunktion

$$P^{(\cdot a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = L^{-1}\left\{\frac{1}{s}\psi^{(\cdot a)}(s/\mu_1,\mu_2;\xi)\right\} \tag{47}$$

$$= \Phi\left(\frac{\mu_1 t - 1 + \xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) + e^{2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}}\Phi\left(\frac{-\mu_1 t - 1 + \xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) \quad (\mu_1 \in [0,\infty))$$

(DOETSCH [10], S. 105 Nr. 1 in Verbindung mit Satz 2.1.10). In den Gleichungen (46) kommt zum Ausdruck, daß Adsorption in endlicher Zeit nur im Falle $\mu_1 \in [0,\infty)$ mit Wahrscheinlichkeit 1, im Falle $\mu_1 \in (-\infty,0)$ dagegen mit der kleineren Wahrscheinlichkeit $e^{2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ eintritt. Die bedingte Verteilungsfunktion für die Adsorption ergibt sich aus (47) zu

$$P^{(\cdot a)*}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \Phi\left(\frac{-\mu_1 t - 1 + \xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) + e^{-2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}}\Phi\left(\frac{\mu_1 t - 1 + \xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) \quad (\mu_1 \in (-\infty,0)). \tag{48}$$

Der Vergleich mit (47) führt zu dem Satz:

Satz 2: Der Prozeß $P^{(\cdot a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ führt für $\mu_1 \in [0,\infty)$ mit Wahrscheinlichkeit 1, für $\mu_1 \in (-\infty,0)$ mit Wahrscheinlichkeit $e^{2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ zur Adsorption; in letzterem Fall ist die bedingte Adsorptionszeitverteilung $P^{(\cdot a)*}(t)$ gegeben durch

$$P^{(\cdot a)*}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = P^{(\cdot a)}(t/-\mu_1,\mu_2;\xi) \quad (\mu_1 \in (-\infty,0)). \tag{49}$$

Dichte bzw. bedingte Dichte sind für $t > 0$ durch

$$p^{(\cdot a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \frac{1-\xi}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\, t^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{(\mu_1 t)^2 - 2(1-\xi)\mu_1 t + (1-\xi)^2}{2\mu_2 t}} \qquad (\mu_1 \in [0,\infty)), \quad (50)$$

$$p^{(\cdot a)*}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = p^{(\cdot a)}(t/-\mu_1,\mu_2;\xi) \qquad (\mu_1 \in (-\infty,0)) \quad (51)$$

gegeben.

Für die durch

$$\psi^{(aa)}_{k,N}(s/\lambda,\mu) = \frac{w_2^k - w_1^k}{w_2^N - w_1^N}, \qquad \psi^{(aa)}_{k,0}(s/\lambda,\mu) = \left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^k \frac{w_2^{N-k} - w_1^{N-k}}{w_2^N - w_1^N}$$

gegebenen (nicht normierten) Verteilungen (vgl.2.3(2a), (2b)) lauten aufgrund von (42), (43) und (44) die Grenzfunktionen

$$\psi^{(aa)}(s/\mu_1,\mu_2;\xi,1) = \lim_{m\to\infty} \psi^{(aa)}_{k,N}(s/\lambda,\mu) = e^{(1-\xi)\gamma} \frac{\gamma_{in}(\xi\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2})}{\gamma_{in}\sqrt{\beta^2 s+\gamma^2}}, \qquad (52a)$$

$$\psi^{(aa)}(s/\mu_1,\mu_2;\xi,0) = \lim_{m\to\infty} \psi^{(aa)}_{k,0}(s/\lambda,\mu) = e^{-2\xi\gamma}\, \psi^{(aa)}(s/\mu_1,\mu_2;1-\xi,1), \qquad (52b)$$

denen im Originalraum die (nicht normierten) Dichten

$$p^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi,1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu_2}} \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^\nu \left\{1+2\left[\frac{\nu}{2}\right]-(-1)^\nu\xi\right\} e^{-\frac{(\mu_1 t)^2 - 2(1-\xi)\mu_1 t + \left\{1+2\left[\frac{\nu}{2}\right]-(-1)^\nu\xi\right\}^2}{2\mu_2 t}}, \quad (53a)$$

$$p^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi,0) = e^{-2\xi\gamma}\, p^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;1-\xi,1) \qquad (53b)$$

zugeordnet sind. Mit $\left[\frac{\nu}{2}\right]$ ist die größte ganze Zahl kleiner oder gleich $\frac{\nu}{2}$ bezeichnet. Für die durch 2.3(1) gegebene Verteilung

$$\psi^{(aa)}_k(s/\lambda,\mu) = \psi^{(aa)}_{k,N}(s/\lambda,\mu) + \psi^{(aa)}_{k,0}(s/\lambda,\mu)$$

schließlich ergibt sich die Grenzdichte

$$p^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \lim_{m\to\infty} p_k^{(aa)}(t/\lambda,\mu)$$

$$= p^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi,1) + p^{(aa)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi,0). \qquad (54)$$

(53a) und (53b) sind Thetafunktionen.
Der folgende Satz besagt, daß für die Tabellierung von P bei festem ξ nur zwei Eingänge, für $\mu_2 t$ und γ, nötig sind.

Satz 3: Die Verteilungsfunktion $P(t/\mu_1, \mu_2; \xi)$ ist Funktion von $\mu_2 t$, $\mu_1/\mu_2 = \gamma$ und ξ allein.

Der Beweis ergibt sich aus der aus

$$\frac{1}{\mu_2 s}\psi(\mu_2 s) = \int_0^\infty e^{-\mu_2 s t} p(t)\,dt$$

$$= \frac{1}{\mu_2}\int_0^\infty e^{-s\tau} p\left(\frac{\tau}{\mu_2}\right) d\tau$$

folgenden Gleichung

$$\int_0^\infty e^{-s\tau} p\left(\frac{\tau}{\mu_2}/\mu_1,\mu_2;\xi\right) d\tau = \frac{1}{s}\psi(\mu_2 s/\mu_1,\mu_2;\xi)$$

und der Bemerkung, daß $\psi(\mu_2 s/\mu_1, \mu_2;\xi)$ (vgl. (4)) nur von s, γ und ξ abhängig ist.

Korollar: Die Verteilungsfunktion $P(t/\mu_1, \mu_2; \xi)$ ist Funktion von $\mu_1 t$, $\mu_2 t$ und ξ allein.
Der Beweis ergibt sich aus dem eben bewiesenen Satz und der Beziehung $\gamma \equiv \frac{\mu_1 t}{\mu_2 t}$ unmittelbar.

2.5. Erwartungswert und Varianz der Adsorptionszeit

Die nichtzentrierten Momente

$$M_j' = \int_0^\infty t^j p(t/\mu_1,\mu_2;\xi)\,dt \quad (\mu_1\in(-\infty,+\infty), \mu_2\in(0,+\infty), \xi\in[0,1))$$

lassen sich am einfachsten nach der Formel

$$M_j' = (-1)^j\left(\frac{2}{\mu_2}\right)^j \frac{d^j}{ds'^j}\,\psi\left(\frac{\mu_2}{2}(s'-\gamma^2)/\mu_1,\mu_2;\xi\right)\Big|_{s'=\gamma^2}$$

berechnen. Die Berechnung der Differentialquotienten läßt sich weitgehend vereinfachen, wenn man den Umstand ausnutzt, daß in 2.4.(4) der Zähler für $\xi = 1$ gleich dem Nenner ist und der erste Summand des

Zählers durch Umkehrung der Vorzeichen von γ und ξ in den zweiten Summanden übergeht. Für die Momente erster und zweiter Ordnung findet man

$$M_1' = E\{t\} = \begin{cases} \frac{\mu_2}{2\mu_1^2}\left[e^{-\frac{2\mu_1}{\mu_2}} - e^{-\frac{2\mu_1}{\mu_2}\xi} + \frac{2\mu_1}{\mu_2}(1-\xi)\right] & (\mu_1 \neq 0) \\ \frac{1-\xi^2}{\mu_2} & (\mu_1 = 0) \end{cases} \tag{1}$$

$$M_2' = E\{t^2\} = \begin{cases} \frac{\mu_2^2}{2\mu_1^4}\left\{e^{-\frac{4\mu_1}{\mu_2}} - e^{-\frac{2\mu_1}{\mu_2}(1+\xi)} + \left(2 + \frac{6\mu_1}{\mu_2} - \frac{2\mu_1}{\mu_2}\xi\right)e^{-\frac{2\mu_1}{\mu_2}} - \right. & \\ \left. - \left(2 + \frac{2\mu_1}{\mu_2} + \frac{2\mu_1}{\mu_2}\xi\right)e^{-\frac{2\mu_1}{\mu_2}\xi} + \frac{2\mu_1}{\mu_2}(1-\xi)\left[1 + \frac{\mu_1}{\mu_2}(1-\xi)\right]\right\} & (\mu_1 \neq 0) \\ \frac{(1-\xi^2)(5-\xi^2)}{3\mu_2^2} & (\mu_1 = 0), \end{cases}$$

und für die Varianz ergibt sich hieraus

$$\sigma^2(t) = E\{t^2\} - E^2\{t\} = \begin{cases} \frac{\mu_2^2}{4\mu_1^4}\left[e^{-\frac{4\mu_1}{\mu_2}} - e^{-\frac{4\mu_1}{\mu_2}\xi} + 4\left(1 + \frac{2\mu_1}{\mu_2}\right)e^{-\frac{2\mu_1}{\mu_2}} - 4\left(1 + \frac{2\mu_1}{\mu_2}\xi\right)e^{-\frac{2\mu_1}{\mu_2}\xi} + \frac{4\mu_1}{\mu_2}(1-\xi)\right] & (\mu_1 \neq 0) \\ \frac{2(1-\xi^4)}{3\mu_2^2} & (\mu_1 = 0). \end{cases} \tag{2}$$

3. KONVERGENTE REIHENENTWICKLUNGEN FÜR DIE VERTEILUNG DER ADSORPTIONSZEIT

In diesem Kapitel werden zwei verschiedene, auf Anwendungen der Sätze 2.1.7 und 2.1.8 beruhende konvergente Reihenentwicklungen für P(t) und p(t) hergeleitet.

Voraussetzung für die Anwendbarkeit des Satzes 2.1.7 ist die Meromorphie von $\psi^*(s)$. Daß ψ^* mindestens in $\Re s > 0$ holomorph ist, ergibt sich aus Satz 2.4.1 in Verbindung mit Satz 2.1.2.

3.1. Meromorphie von $\psi^*(s/\mu_1, \mu_2; \xi)$

Mit der Hilfsvariablen

$$z = z(s) = i\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2} = i\beta\sqrt{s + \alpha^2} \tag{1}$$

läßt sich die rechte Seite von 2.4(4) auf die übersichtlere Gestalt

$$\psi(s) = \chi(z) = \frac{e^{-\xi\gamma}\left[(iz+\gamma)\ e^{i\xi z} + (iz-\gamma)\ e^{-i\xi z}\right]}{e^{-\gamma}\left[(iz+\gamma)\ e^{iz} + (iz-\gamma)\ e^{-iz}\right]} \tag{2a}$$

$$= \frac{e^{-\xi\gamma}\ (z\cos\xi z + \gamma\sin\xi z)}{e^{-\gamma}\ (z\cos z + \gamma\sin z)} \qquad (\Re s \geq 0) \tag{2b}$$

bringen, die in beiden Varianten nützlich sein wird.

Satz 1: $\psi^*(s/\mu_1, \mu_2; \xi)$ ist für jedes $\mu_1 \in (-\infty, +\infty)$, $\mu_2 \in (0, +\infty)$ und $\xi \in [0,1)$ eine transzendente meromorphe Funktion von s, deren sämtliche Pole von erster Ordnung sind und genau in den Punkten

$$s_j = -\alpha^2 - \frac{\mu_2}{2} z_j^2 \tag{3a}$$

$$\left(z_j \in \{z \mid -\gamma = z \operatorname{cotg} z;\ z \neq \frac{m\pi}{1-\xi};\ m = 0, \pm 1, \ldots\}\right)$$

$$= -\frac{\mu_2}{2} \frac{z_j^2}{\sin^2 z_j} \tag{3b}$$

liegen. Die Residuen betragen

$$\operatorname{Res}\{\psi^*(s/\mu_1, \mu_2; \xi); s_j\} = \begin{cases} 2\mu_2 e^{(1-\xi)\gamma} \dfrac{z_j^2 \sin[(1-\xi)z_j]}{2z_j - \sin 2z_j} & (z_j \neq 0) \quad (4a) \\ \dfrac{3}{2}\mu_2 (1-\xi) e^{-(1-\xi)} & (z_j = 0). \quad (4b) \end{cases}$$

Beweis: Aus (1) und (2a) ergibt sich zunächst, daß $\psi^*(s)$ in der offenen s-Ebene keine wesentlichen Singularitäten hat. Denn z(s) besitzt keine solchen, und da z(s) den Wert ∞ in der offenen Ebene nicht annimmt, besitzen dort auch $e^{i\xi z(s)}, e^{iz(s)}$ keine wesentlichen Singularitäten. Ferner hat $\psi^*(s)$ in der abgeschlossenen s-Ebene keine Verzweigungspunkte. Denn $\chi(z)$ ist als Quotient zweier ganzer Funktionen von z meromorph in z und hat folglich um z = 0 eine Laurententwicklung. Diese kann wegen der aus (2b) unmittelbar ablesbaren Beziehung

$$\chi(z) = \chi(-z) \tag{5}$$

nur gerade Potenzen von z, d. h. ganze Potenzen von $s + \alpha^2$ enthalten, woraus folgt, daß $\psi^*(s)$ im Punkt $s = -\alpha^2$ unverzweigt ist. Auch an jeder Stelle $s \neq -\alpha^2$ (einschließlich $s = \infty$) ist $\psi^*(s)$ unverzweigt, da die Funktionen z(s), $e^{i\xi z(s)}$, $e^{iz(s)}$ es sind. $\psi^*(s)$ kann somit in der offenen s-Ebene höchstens Pole als Singularitäten haben und ist folglich meromorph. Im Punkt $s = \infty$ ist $\psi^*(s)$ wegen $\xi \neq 1$ wesentlich singulär, woraus die Transzendenz von $\psi^*(s)$ folgt.

Die Potenzreihenentwicklung des Zählers und Nenners von (2b) um $z(s) = 0$ führt auf

$$\chi(z(s)) = \frac{e^{-i\xi\gamma}\left(1 + i\xi\gamma - + \ldots\right)}{e^{-\gamma}\left[1 + \gamma - \frac{1}{6}(3+\gamma)\,z^2(s) + \cdots\right]}\,, \qquad (6)$$

wobei jeweils nur gerade Potenzen von z auftreten, in Übereinstimmung mit (5). Der Punkt $0 = z_1$ ist für jedes $\xi \in [0,1)$ genau im Falle $\gamma = -1$, d.h. $\mu_1 = -\mu_2$, Polstelle, mit einem Pol erster Ordnung in $-\mu_2/2 = s_1$ und dem Residuum (4b).

Damit sind nur noch die Polstellen $z_j \neq 0$ von $\chi^*(z)$ zu bestimmen. Für diese muß gelten $\sin z_j \neq 0$, da andernfalls die Gleichung

$$z_j \cos z_j + \gamma \sin z_j = 0,$$

die nach (2b) notwendige Bedingung für einen Pol in z_j ist, nicht bestehen könnte. Diese Gleichung darf daher durch $\sin z_j$ dividiert werden und führt damit auf $z_j \operatorname{cotg} z_j + \gamma = 0$. Wird jetzt nachträglich $z_1 = 0$ eingesetzt, so ergibt sich mit $\gamma = -1$ gerade die oben gefundene Bedingung für einen Pol an dieser Stelle. Damit ist

$$-\gamma = z_j \operatorname{cotg} z_j \quad (\gamma \in (-\infty, +\infty)) \qquad (7)$$

als notwendige Bedingung für einen Pol in z_j erkannt.

Durch Einsetzen von (7) in (2a) ergibt sich, wenn $w = z - z_j$ gesetzt wird,

$$\chi(z) = \frac{e^{-i\xi\gamma}\left\{\left[w+z_j(1+i\operatorname{cotg} z_j)\right] e^{i\xi(w+z_j)} + \left[w+z_j(1-i\operatorname{cotg} z_j)\right] e^{-i\xi(w+z_j)}\right\}}{e^{-\gamma}\left\{\left[w+z_j(1+i\operatorname{cotg} z_j)\right] e^{i(w+z_j)} + \left[w+z_j(1-i\operatorname{cotg} z_j)\right] e^{-i(w+z_j)}\right\}}$$

$$= \frac{e^{-i\xi\gamma}\left\{-2z_j \sin\left[(1-\xi)z_j\right] + \ldots\right\}}{e^{-\gamma}\left\{(2z_j - \sin 2z_j)(z-z_j) + \ldots\right\}}$$

und hieraus wegen

$$z - z_j = -z_j\left[1 - \sqrt{1 - \frac{2(s-s_j)}{\mu_2 z_j^2}}\right] \quad (z_j \neq 0)$$

$$= -\frac{s-s_j}{\mu_2 z_j} + \ldots$$

schließlich

$$\psi^*(s/\mu_1,\mu_2;\xi) = 2\mu_2 \frac{e^{-\xi\gamma}\left\{z_j^2 \sin\left[(1-\xi)z_j\right] + \dots\right\}}{e^{-\gamma}\left\{(2z_j - \sin 2z_j)(s - s_j) + \dots\right\}} . \qquad (8)$$

Für den im Nenner auftretenden Koeffizienten von $s - s_j$ gilt

$$2z_j - \sin 2z_j \neq 0 \quad (z_j \neq 0), \qquad (9)$$

so daß alle Pole von erster Ordnung sind. Neben die notwendige Bedingung (7) für einen Pol in $s_j \neq -\mu_2/2$ tritt aufgrund von (8) $\sin\left[(1-\xi)z_j\right] \neq 0$, d.h.

$$z_j \neq \frac{m\pi}{1-\xi} \qquad (m = 0, \pm 1, \dots)$$

als hinreichende Bedingung hinzu.

Die Darstellung (3a) der Polstellen ist eine Folge von (1). (3b) ergibt sich aus (3a) durch Eliminieren von μ_1 mittels Gleichung (7).

Damit ist der Satz bewiesen.

Wir wissen vom Beweis des Satzes 2.4.1, daß sämtliche Polstellen (3) auf der negativ-reellen s-Achse liegen. Für die bei Anwendung des Satzes 2.1.7 erforderliche Konstruktion der Kurven $\mathcal{L}_j$ ist jedoch eine genauere Kenntnis der Polstellen notwendig. Es gilt

Satz 2: Die sämtlichen Polstellen s_j von $\psi(s/\mu_1,\mu_2;\xi)$ können so numeriert werden, daß

$$-\alpha^2 - \frac{\mu_2}{2} j^2\pi^2 < s_j < -\alpha^2 - \frac{\mu_2}{2}(j-1)^2\pi^2 \quad (j = 1,2,\dots). \qquad (10)$$

Beweis: Es wird gezeigt, daß Gleichung (7) nur reelle und höchstens eine rein imaginäre, darüber hinaus keine weiteren Wurzeln hat. Die Behauptung des Satzes folgt dann aus der Darstellung (3) der Polstellen.

Die Wurzel $z_1 = 0$ ist reell. Für $z_j \neq 0$ ist (7) wegen $\sin z_j \neq 0$ gleichbedeutend mit $z_j \cos z_j + \gamma \sin z_j = 0$, was mit $z_j = u_j + iv_j$ (bei Unterdrückung von j) auf die Gleichung

$$(u+iv)(\cos u\cosh v - i \sin u\sinh v) + \gamma(\sin u\cosh v + i \cos u\sinh v) = 0$$

führt. Sie darf unter der Voraussetzung $uv \neq 0$ mit

$$2(\cos u \operatorname{Lof} v + i \sin u \operatorname{tin} v)$$

multipliziert werden, wodurch zunächst

$$2(u+iv)(\cos^2 u + \operatorname{tin}^2 v) + \gamma(\sin 2u + i \operatorname{tin} 2v) = 0$$

und nach Trennung von Real- und Imaginärteil

$$\begin{aligned} 2u(\cos^2 u + \operatorname{tin}^2 v) + \gamma \sin 2u &= 0 \\ 2v(\cos^2 u + \operatorname{tin}^2 v) + \gamma \operatorname{tin} 2v &= 0 \end{aligned}$$

erhalten wird. Aus diesen Gleichungen folgt der Widerspruch

$$u = 0, \qquad v = 0 \qquad (\gamma = 0)$$

$$\frac{\sin 2u}{2u} = \frac{\operatorname{tin} 2v}{2v} \qquad (\gamma \neq 0)$$

zu der Voraussetzung $uv \neq 0$, womit gezeigt ist, daß Gleichung (7) höchstens reelle und rein imaginäre Wurzeln hat. Sie werden durch die Ansätze $z = u$ bzw. $z = iv$, die auf die Gleichungen

$$-\gamma = u \operatorname{cotg} u \tag{11}$$

$$-\gamma = v \operatorname{Lotg} v \tag{12}$$

führen, ermittelt. Im Falle $\gamma \in (-1, +\infty)$ sind nur reelle Wurzeln vorhanden, und zwar genau eine Wurzel auf jedem Zweig des cotg u. Im Falle $\gamma \in (-\infty, -1]$ dagegen ist nur auf den Nebenzweigen des cotg u je eine reelle Wurzel vorhanden; hinzu kommt genau eine rein imaginäre Wurzel $\pm iv$, wobei $\pm v$ einzige, im Falle $\gamma = -1$ in 0 ausartende Wurzel von (12) ist.[1] Werden die über der positiven u-Achse liegenden Zweige des cotg u fortlaufend mit 1, 2, ... numeriert, und wird ferner mit u_j die auf dem j-ten Zweig des cotg liegende Wurzel bezeichnet, so ergibt sich die folgende Übersicht über die Wurzeln von (7):

	z_1	z_2	z_3 .....
a) Im Falle $\gamma \in (-\infty, -1]$:	iv_1	u_2	u_3 .....
b) Im Falle $\gamma \in (-1, +\infty)$:	u_1	u_2	u_3 .....

1) Die Übersicht über die Gesamtheit der reellen Wurzeln im Falle $\gamma \neq 0$ wird erleichtert, wenn Gleichung (11) auf die Gestalt $-\frac{u}{\gamma} = \operatorname{tg} u$ gebracht wird.

Im Falle b) sind alle, im Falle a) alle z_j außer dem ersten reell und von Null verschieden. Daß die zugehörigen s_j negativ-reell sind, ergibt sich aus (3b) unmittelbar. Auch das im Falle a) vorhandene rein imaginäre z_1 führt auf negativ-reelles s_1, denn aus (3b) folgt

$$s_1 = -\frac{\mu_2}{2}\,\frac{z_1^2 \operatorname{cotg}^2 z_1}{\cos^2 z_1} = -\frac{\mu_2}{2}\,\frac{\gamma^2}{\cos^2 i v_1} \qquad \text{aufgrund von (7),}$$

$$= -\frac{\alpha^2}{\mathfrak{Co}\mathfrak{f}^2 v_1} < 0$$

wegen $\mu_1 \in (-\infty, -\mu_2]$.

Damit ist der Satz bewiesen.

Da u_j auf dem j-ten Zweig des cotg liegt, besteht für die Polstellen s_j die Abschätzung (10). Sie gilt, wie man leicht zeigt, nicht nur für $j = 2, 3, \ldots$, sondern auch für $j = 1$.

Im folgenden wird unter s_j stets die den Ungleichungen (10) genügende Polstelle verstanden.

3.2. Erste Reihenentwicklung für P(t) und p(t)

Hilfssatz 1: Für jedes $\mu_1 \in (-\infty, +\infty)$, $\mu_2 \in (0, +\infty)$ und $\xi \in [0,1)$ gilt

$$\lim_{s \to \infty} \psi^*(s/\mu_1, \mu_2; \xi) = 0, \qquad (1)$$

wenn s in einem Winkelraum

$$|\arg(s + \alpha^2)| \le \pi - \delta \quad (\delta \in (0,\pi)) \qquad (2)$$

(bei Normierung des arc auf das Intervall $(-\pi, \pi]$) zweidimensional gegen ∞ strebt.

Korollar: Der Hilfssatz gilt auch, wenn der Winkelraum (2) ersetzt wird durch einen Winkelraum

$$|\arg(s - \tilde{s})| \le \pi - \delta \quad (\delta \in (0,\pi)) \qquad (3)$$

mit beliebigem $\tilde{s}$.

Beweis: Aus (2) folgt aufgrund von 3.1(1)

$$-\left(\frac{\pi}{2}-\frac{\delta}{2}\right)\le arc(-iz)\le\frac{\pi}{2}-\frac{\delta}{2},\quad \frac{\pi}{2}+\frac{\delta}{2}\le arc(iz)\le\frac{3\pi}{2}-\frac{\delta}{2}$$

($\frac{\delta}{2}\in(0,\frac{\pi}{2})$). Strebt s in dem Winkelraum (2) gegen ∞, so konvergieren iz und -iz in diesen Winkelräumen gegen ∞. Folglich konvergiert von den in 3.1(2a) auftretenden Größen e^{iz}, e^{-iz} die eine dem Betrage nach gegen $+\infty$, die andere gegen 0, so daß $\chi(z)$ wegen $\xi\in[0,1)$ gegen 0 konvergiert, was zu beweisen war. - Der Beweis des Korollars ergibt sich aus der Bemerkung, daß jeder Winkelraum (3) für $|s|\ge\sigma$ bei passend gewähltem $\sigma>0$ in einem Winkelraum (2) mit etwas kleinerem δ enthalten ist.

Satz 1: $P(t)=L^{-1}\left\{\frac{1}{s}\psi(s)\right\}$ und $p(t)=L^{-1}\left\{\psi(s)\right\}$ werden für $\mu_1\in(-\infty,+\infty)$, $\mu_2\in(0,+\infty)$, $\xi\in[0,1)$ auf $t\ge0$ durch die Dirichlet'schen Reihen

$$P(t/\mu_1,\mu_2;\xi)=1-4\sum_{j=1}^{\infty}\frac{\sin^2 z_j\,\sin[(1-\xi)z_j]}{2z_j-\sin 2z_j}\,e^{(1-\xi)\gamma+s_jt},\qquad(4a)$$

$$p(t/\mu_1,\mu_2;\xi)=2\mu_2\sum_{j=1}^{\infty}\frac{z_j^2\sin[(1-\xi)z_j]}{2z_j-\sin 2z_j}\,e^{(1-\xi)\gamma+s_jt}\qquad(4b)$$

gegeben, wobei im Falle $\mu_1=-\mu_2$, in dem $z_1=0$ (vgl. Beweis von Satz 3.1.1), für das jeweils erste Glied unter dem Summenzeichen zu setzen ist

$$\frac{3}{4}(1-\xi)\,e^{-(1-\xi)-\frac{\mu_2}{2}t}=\lim_{z_1\to0}\frac{z_1^2\sin[(1-\xi)z_1]}{2z_1-\sin 2z_1}\,e^{(1-\xi)\gamma+s_1t}.\qquad(4c)$$

Auch die einzelnen Glieder der Reihe (4a) hängen nur von $\mu_1 t$, $\mu_2 t$, ξ ab (vgl. Satz 2.4.3).

Der Beweis des Satzes beruht auf der Anwendung des Satzes 2.1.7 auf $F(t)=P(t)$.

P(t) erfüllt als Verteilungsfunktion die Voraussetzungen des Satzes 2.1.6 über $F(t)$, so daß für jedes $x_0>0$ die Umkehrformel

$$P(t)=V.P.\frac{1}{2\pi i}\int_{x_0-i\infty}^{x_0+i\infty}e^{ts}\frac{1}{s}\psi(s)\,ds\qquad(t\ge0)\qquad(5)$$

gilt. Als erfüllt nachzuweisen sind die Bedingungen 1) bis 4) des Satzes 2.1.7.

Zu 1). Mit $\psi^*(s)$ ist auch $\frac{1}{s}\,\psi^*(s)$ meromorph; zu den Polstellen 3.1(3) kommt

$$s = 0 \qquad (6)$$

als weitere Polstelle hinzu, mit einem Pol erster Ordnung und dem Residuum 1.

Zu 2). Für die auf dem Integrationsweg des Integrals (5) zu wählenden Punktpaare $(x_o - iy_j,\ x_o + iy_j)$ werde gesetzt

$$y_j = x_o + \alpha^2 + \frac{\mu_2}{2}\, j^2 \pi^2 \quad (j=1,2,\ldots). \qquad (7)$$

Dann gilt $\lim\limits_{j\to\infty} y_j = +\infty$.

Zu 3). Als Integrationswege $\mathcal{L}_j$ werden die Halbkreise mit der Parameterdarstellung

$$\mathcal{L}_j:\ s = s(\sigma/j) = x_o + y_j\, e^{i\sigma} \quad \left(\frac{\pi}{2} \le \sigma \le \frac{3\pi}{2};\ j=1,2,\ldots\right) \qquad (8)$$

gewählt. $\mathcal{L}_j$ schneidet die reelle s-Achse im Punkt

$$r_j = s(\pi/j) = x_o - y_j = -\alpha^2 - \frac{\mu_2}{2}\, j^2\pi^2, \qquad (9)$$

der nach 3.1(10) zwischen den Polstellen s_{j+1} und s_j liegt, so daß $\mathcal{L}_j$ zusammen mit dem zwischen $x_o - iy_j$, $x_o + iy_j$ gelegenen Geradenstück genau die Polstellen 0 (vgl. (6)) und $s_1, s_2, \ldots, s_j$ einschließt.
Aus (8) und (9) folgt die Abschätzung

$$|s(\sigma/j)| \ge |r_j| \quad \left(\sigma \in \left[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right]\right). \qquad (10)$$

Ferner gilt

$$\operatorname{arc}(s(\sigma/j) - x_o) = \sigma \quad \left(\sigma \in \left[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right],\ j=1,2,\ldots\right). \qquad (11)$$

Zu 4). Mit der Parameterdarstellung (8) für $\mathcal{L}_j$ wird

$$\int_{\mathcal{L}_j} e^{ts}\,\frac{1}{s}\,\psi^*(s)\,ds = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \frac{y_j}{s(\sigma/j)}\, e^{t(x_o + y_j\cos\sigma) + i\left(\frac{\pi}{2} + \sigma + ty_j \sin\sigma\right)} \times \psi^*(s(\sigma/j))\,d\sigma,$$

woraus sich unter Benutzung von (10) die Abschätzung

$$\left|\int_{\mathcal{L}_j} e^{ts}\,\frac{1}{s}\,\psi^*(s)\,ds\right| \le e^{tx_o} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \frac{y_j}{|r_j|}\, e^{ty_j\cos\sigma}\,\left|\psi^*(s(\sigma/j))\right|\,d\sigma \qquad (12)$$

ergibt. Es wird nun gezeigt, daß die rechte und folglich die linke Seite dieser Ungleichung für $j \to \infty$ gegen 0 konvergiert. Beim Beweis sind für $\sigma \in \left[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right]$ die Fälle $\sigma \neq \pi$ und $\sigma = \pi$ zu unterscheiden.

Zu jedem $\sigma \neq \pi$ gibt es nach (11) ein $\delta_\sigma \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right]$, mit dem die Gleichung

$$\left| arc\left(s(\sigma/j) - x_0\right)\right| = \pi - \delta_\sigma \qquad (j = 1, 2, \ldots)$$

(bei Normierung des arc auf das Intervall $(-\pi, +\pi]$) besteht, so daß nach dem Korollar zu Hilfssatz 1, $\tilde{s} = x_0$ gesetzt,

$$\lim_{j \to \infty} \left| \psi^*(s(\sigma/j))\right| = 0 \qquad (\sigma \neq \pi)$$

folgt. Da der andere Faktor

$$\frac{y_j}{|r_j|} e^{ty_j \cos} \tag{13}$$

des Integranden (12) für jedes $\sigma \in \left[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right]$ beschränkt ist (vgl. (7) und (9)), ist die Behauptung für $\sigma \neq \pi$ bewiesen.

Für $\sigma = \pi$ konvergiert umgekehrt der Faktor (13) für $j \to \infty$ gegen 0, wogegen $\left| \psi^*(s(\pi/j))\right|$ beschränkt ist. Letzteres ergibt sich durch Einsetzen von (9) in 3.1(2b), was wegen $z(s) = -j\pi$ $(s = r_j)$ auf

$$\psi^*(r_j) = (-1)^j e^{(1-\xi)\gamma}\left[\cos(j\xi\pi) + \frac{\gamma}{j\pi}\sin(j\xi\pi)\right] \quad (j = 1, 2, \ldots)$$

führt. Hieraus ergibt sich die Abschätzung

$$\left|\psi^*(r_j)\right| \leq (1 + |\gamma|)\, e^{(1-\xi)\gamma} \qquad (j = 1, 2, \ldots).$$

Insgesamt ist gezeigt, daß der Integrand der rechten Seite von (12) in dem endlichen abgeschlossenen Integrationsintervall für $j \to \infty$ gegen 0 konvergiert. Folglich konvergiert auch das Integral gegen 0, was zu beweisen war.

Damit sind sämtliche Voraussetzungen des Satzes 2.1.7 als erfüllt nachgewiesen, und aus 2.1(3) ergibt sich unter Beachtung der zusätzlich zu s_1, s_2, ... hinzukommenden Polstelle (6) von $\frac{1}{s}\psi^*(s)$

$$P(t/\mu_1, \mu_2; \xi) = Res\left\{e^{ts}\frac{1}{s}\psi^*(s)/0\right\} + \sum_{j=1}^{\infty} Res\left\{e^{ts}\frac{1}{s}\psi^*(s)/s_j\right\}$$

$$= 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{ts_j}}{s_j}\, Res\left\{\psi^*(s)/s_j\right\}.$$

Hieraus ergibt sich nach Einsetzen von 3.1(3) und 3.1(4) für P(t) die Reihe (4a). Ihre gliedweise Differentiation nach t liefert eine Reihe, deren gleichmäßige Konvergenz durch die Ungleichungen 3.1(10) gesichert ist, und die folglich die Verteilungsdichte p(t) darstellt. Sie wird durch Benutzung von 3.1(3b) auf die Gestalt (4b) gebracht. (4c) ergibt sich auch aus 3.1(4b).

Damit ist der Satz bewiesen.

3.3. Zweite Reihenentwicklung für P(t) und p(t)

Sie wird durch Anwendung des Satzes 2.1.8 hergeleitet. Durch geometrische Reihenentwicklung von $\frac{1}{s}\,\psi(s)$:

$$\frac{1}{s}\,\psi(s/\mu_1,\mu_2;\xi)=\frac{1}{s}\sum_{\nu=0}^{\infty}\psi_\nu(s/\mu_1,\mu_2;\xi) \qquad (\Re s \geq x_0)$$

und gliedweise Rücktransformation entsteht eine Reihe aus dem Originalraum, von der gezeigt wird, daß sie konvergiert und für $t > 0$ die Verteilungsfunktion P(t) darstellt.

Zunächst ist eine Betrachtung zur Wahl von x_0 notwendig. Die gleich vorzunehmende Reihenentwicklung von $\psi(s)$ konvergiert nämlich im allgemeinen nicht in der ganzen Konvergenzhalbebene $\Re s \geq 0$ von $L\{p\}$, sondern nur für solche s, die der Bedingung

$$\left| \frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\alpha}{\sqrt{s+\alpha^2}+\alpha}\, e^{-2\beta\sqrt{s+\alpha^2}} \right| < 1 \qquad \left(\alpha=\frac{\mu_1}{\sqrt{2\mu_2}},\beta=\sqrt{\frac{2}{\mu_2}}\right)$$

genügen. Nur für $\gamma \in (0,\infty)$ ist sie in der Halbebene $\Re s \geq 0$ erfüllt, für $\gamma \in (-\infty, 0]$ dagegen nur in einer Halbebene $\Re s \geq x_0$, wobei $x_0 > 0$ eine von α und β abhängige positive Zahl ist. Aus beweistechnischen Gründen wird jedoch x_0 der schärferen Einschränkung

$$\left| \frac{\sqrt{s+\alpha^2}+|\alpha|}{\sqrt{s+\alpha^2}-|\alpha|}\, e^{-2\beta\sqrt{s+\alpha^2}} \right| < 1 \qquad \left(\Re s \geq x_0 = x_0(|\alpha|,\beta)\right) \qquad (7)$$

unterworfen.

Für $\Re s \geq x_0$ kann die rechte Seite von 2.4(4) in die Gestalt

$$\psi(s/\mu_1,\mu_2;\xi) = e^{(1-\xi)\gamma}\,\frac{e^{-(1-\xi)\beta\sqrt{s+\alpha^2}} + \frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\alpha}{\sqrt{s+\alpha^2}+\alpha}\,e^{-(1+\xi)\beta\sqrt{s+\alpha^2}}}{1+\frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\alpha}{\sqrt{s+\alpha^2}+\alpha}\,e^{-2\beta\sqrt{s+\alpha^2}}} \qquad (2)$$

gebracht und in die konvergente geometrische Reihe

$$\psi(s) = e^{(1-\xi)\gamma}\left[e^{-(1-\xi)\beta\sqrt{s+\alpha^2}} + \frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\alpha}{\sqrt{s+\alpha^2}+\alpha}\,e^{-(1+\xi)\beta\sqrt{s+\alpha^2}}\right] \times$$

$$\times \sum_{\nu=0}^{\infty}(-1)^{\nu}\left(\frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\alpha}{\sqrt{s+\alpha^2}+\alpha}\right)^{\nu} e^{-2\nu\beta\sqrt{s+\alpha^2}} \qquad (\Re s \geq x_0) \quad (3)$$

entwickelt werden. Mit der für $\nu = 0, 1, \ldots$ geltenden Identität

$$\left(\frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\alpha}{\sqrt{s+\alpha^2}+\alpha}\right)^{\nu} = 1 - 2\alpha\sum_{\mu=1}^{\nu}\binom{\nu+\mu-1}{2\mu-1}(4\alpha^2)^{\mu-1}\left(\frac{\sqrt{s+\alpha^2}}{s^{\mu}} - \frac{\frac{\nu}{\mu}\alpha}{s^{\mu}}\right) \qquad (\alpha\in(-\infty,+\infty))$$

und den Funktionen (leere Summen sind Null zu setzen)

$$\psi_{\nu}(s) = e^{(1-\xi)\gamma}\cdot(-1)^{\nu}\left\{\left[1 - 2\alpha\sum_{\mu=1}^{\nu}\binom{\nu+\mu-1}{2\mu-1}(4\alpha^2)^{\mu-1}\frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\frac{\nu}{\mu}\alpha}{s^{\mu}}\right]e^{-(2\nu+1-\xi)\beta\sqrt{s+\alpha^2}}\right.$$

$$\left. + \left[1 - 2\alpha\sum_{\mu=1}^{\nu+1}\binom{\nu+\mu}{2\mu-1}(4\alpha^2)^{\mu-1}\frac{\sqrt{s+\alpha^2}-\frac{\nu+1}{\mu}\alpha}{s^{\mu}}\right]e^{-(2\nu+1+\xi)\beta\sqrt{s+\alpha^2}}\right\} \qquad (4)$$

folgt

$$\frac{1}{s}\psi(s) = \frac{1}{s}\sum_{\nu=0}^{\infty}\psi_{\nu}(s/\mu_1,\mu_2;\xi).$$

Diese Entwicklung gestattet einen einfachen Beweis dafür, daß die durch gliedweise Rücktransformation von (3) entstehende Reihe $\{P(t)\}$ für fast alle $t \in (0,\infty)$ konvergiert und die Verteilungsfunktion $P(t)$ darstellt. Sei

$$\{P(t)\} = \sum_{\nu=0}^{\infty} L^{-1}\left\{\frac{1}{s}\psi_{\nu}(s)\right\} \qquad (\Re s \geq x_0)$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} P_{\nu}(t/\mu_1,\mu_2;\xi). \qquad (4a)$$

Die Rücktransformation ist möglich, weil $\frac{1}{s}\psi_{\nu}(s)$ für $\Re s \geq x_0$ Laplace-Transformierte ist, und zwar korrespondieren

a) die Bildfunktion $e^{-(2\nu+1\mp\xi)\beta\sqrt{s+\alpha^2}}$ $(\Re s > -\alpha^2)$

mit der auf $t > 0$ erklärten und dort positiven Originalfunktion

$$\frac{2\nu+1\mp\xi}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\,t^{-\frac{3}{2}}e^{-\alpha^2 t - \frac{(2\nu+1\mp\xi)^2}{2\mu_2 t}} \qquad \text{(DOETSCH [10], S. 105 Nr. 1),} \qquad (5)$$

b) die Bildfunktionen $\frac{\sqrt{s+\alpha^2}}{s^{m+1}}$ und $\frac{1}{s^{m+1}}$ $(\Re s > 0)$ (5a)

für $m = 0$

mit den auf $t > 0$ erklärten und dort positiven Originalfunktionen

$$\frac{e^{-\alpha^2 t}}{\sqrt{\pi t}} + \alpha^2 \int_0^t \frac{e^{-\alpha^2 \tau}}{\sqrt{\pi \tau}}\, d\tau \qquad \text{(a.a.O. S. 87 Nr. 5)} \qquad (6a)$$

bzw. der konstanten Funktion

$$1 \quad (t > 0) \qquad (6b)$$

und für $m = 1, 2, \ldots$ mit Funktionen, die aus (6a) und (6b) jeweils durch m-fach iterierte Integration von 0 bis t hervorgehen. Folglich sind die Originalfunktionen zu (5a) für alle $m = 0,1,2,\ldots$ positiv auf $t > 0$.

Aus der letzten Bemerkung folgt, daß das Vorzeichen des ν-ten Gliedes der Reihe $\{P(t)\}$ im Falle $\mu_1 \in (-\infty, 0]$ durch

$$\operatorname{sgn}\left(P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi)\right) = (-1)^\nu \quad (\mu_1 \in (-\infty, 0];\ t > 0) \qquad (7)$$

gegeben ist, da $(-1)^\nu P_\nu(t)$, wie aus (4) unmittelbar ersichtlich, aus einer Summe von lauter positiven Funktionen und deren ebenfalls positiven Faltungen besteht. Aus diesem Grunde müssen die Beziehungen

$$|P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi)| = (-1)^\nu P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi) \quad (\mu_1 \in (-\infty, 0];\ t > 0) \qquad (8a)$$

und, wie aus (4) ebenfalls unmittelbar ersichtlich,

$$|P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi)| \le (-1)^\nu P_\nu(t/-|\mu_1|, \mu_2; \xi) \quad (\mu_1 \in (0, +\infty);\ t > 0) \qquad (8b)$$

bestehen, und weil $L\{P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi)\}$ in $\mathcal{R}s \ge x_0$ für jedes $\mu_1 \in (-\infty, +\infty)$ existiert, konvergiert auch $L\{|P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi)|\}$ in $\mathcal{R}s \ge x_0$ für jedes $\mu_1 \in (-\infty, +\infty)$.

Damit ist gezeigt, daß die Voraussetzung 1) des Satzes 2.1.8 erfüllt ist.

Die Beziehungen (8a) und (8b) lassen sich zu

$$|P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi)| \le (-1)^\nu P_\nu(t/-|\mu_1|, \mu_2; \xi) \quad (\mu_1 \in (-\infty, +\infty);\ t > 0)$$

zusammenfassen, woraus

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} L\{|P_\nu(t/\mu_1, \mu_2; \xi)|\} \le \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^\nu L\{P_\nu(t/-|\mu_1|, \mu_2; \xi)\} \quad (\mu_1 \in (-\infty, +\infty);\ \mathcal{R}s \ge x_0) \qquad (9)$$

folgt. Die Majorante unterscheidet sich von der für

$$\alpha = \frac{-|\mu_1|}{\sqrt{2\mu_2}}$$

gebildeten geometrischen Reihe (3) nur durch das Fehlen des Faktors $(-1)^\nu$, d. h. sie besitzt dieselben Glieder wie diese, jedoch ohne

alternierendes Vorzeichen, und konvergiert folglich, falls die Entwicklung (3) von

$$\frac{1}{s}\,\psi(s/-|\mu_1|,\mu_2;\xi) \qquad (\Re s \geq x_0)$$

konvergiert. Dies ist der Fall aufgrund der Wahl (1) von x_0. Somit ist

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} L\{|P_\nu(t/\mu_1,\mu_2;\xi)|\}$$

konvergent für jedes $\mu_1 \in (-\infty,+\infty)$.

Damit ist gezeigt, daß neben Voraussetzung 1) auch Voraussetzung 2) des Satzes 2.1.8 erfüllt ist, woraus sich ergibt

Satz 1: Die durch gliedweise Rücktransformation der Bildreihe (3) entstehende Originalreihe konvergiert für $\mu_1 \in (-\infty,+\infty)$, $\mu_2 \in (0,+\infty)$, $\xi \in [0,1)$ und $t \in (0,+\infty)$ und stellt die Verteilungsfunktion $L^{-1}\{\frac{1}{s}\,\psi(s)\} = P(t)$ dar:

$$\{P(t)\} = P(t) \cdot (t>0).$$

Der Satz gilt auch, wenn $\psi(s)$ und $p(t)$ an die Stelle von $\frac{1}{s}\psi(s)$ und $P(t)$ gesetzt werden, da der Beweisgang unverändert auf die mit s multiplizierte Gleichung (3) anwendbar ist.

Die gliedweise Rücktransformation der Reihe (3) setzt die Ermittlung der $p_\nu(t)$ für alle ν voraus.

Zu einem übersichtlichen Ergebnis führt der Sonderfall $\mu_1 = 0$. Dann ist $\alpha = 0$, und aus (3) findet man

$$\frac{1}{s}\,\psi(s/0,\mu_2;\xi) = \sum_{\nu=0}^{\infty}(-1)^\nu\left[\frac{1}{s}\,e^{-(2\nu+1-\xi)\beta\sqrt{s}} + \frac{1}{s}\,e^{-(2\nu+1+\xi)\beta\sqrt{s}}\right],$$

woraus mit $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x} e^{-\xi^2/2}\,d\xi$ folgt

$$P(t/0,\mu_2;\xi) = 2\sum_{\nu=0}^{\infty}(-1)^\nu\left[\Phi\left(-\frac{2\nu+1-\xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) + \Phi\left(-\frac{2\nu+1+\xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right)\right] \qquad (10a)$$

und durch gliedweise Differentiation nach t

$$p(t/0,\mu_2;\xi) = \frac{t^{-3/2}}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\sum_{\nu=0}^{\infty}(-1)^\nu\left[(2\nu+1-\xi)\,e^{-\frac{(2\nu+1-\xi)^2}{2\mu_2 t}} + (2\nu+1+\xi)\,e^{-\frac{(2\nu+1+\xi)^2}{2\mu_2 t}}\right] \qquad (10b)$$

(vgl. DOETSCH [10], S. 105 Nr. 6). Dieses Resultat hat CHANDRASEKHAR [7] unter Benutzung des "Spiegelungsprinzips" hergeleitet, das im Fall $\mu_1 = 0$ leicht anwendbar ist, weil das Wahrscheinlichkeitsfeld bei der Spiegelung in sich selbst übergeht.

Im Falle $\mu_1 \neq 0$ wenden wir auf (3) die Sätze 2.1.10 und 2.1.11 an. Mit $\Psi(s) = \frac{1}{s}\psi(s)$ folgt

$$\Psi\left(\frac{s}{\beta^2}-\alpha^2\right) = \frac{2}{\mu_2} e^{(1-\xi)\gamma}\left\{\frac{e^{-(1-\xi)\sqrt{s}}}{s-\gamma^2} + \sum_{\nu=1}^{\infty}(-1)^{\nu}\frac{(\sqrt{s}-\gamma)^{\nu-1}}{(\sqrt{s}+\gamma)^{\nu+1}}\left[e^{-(2\nu-1+\xi)\sqrt{s}} - e^{-(2\nu+1-\xi)\sqrt{s}}\right]\right\}. \quad (11)$$

Die Originalfunktion zum ersten Summanden ist bekannt. Wird weiter für $\alpha_\nu \in (0,\infty)$

$$\Psi_{1,\nu}(s) = \frac{(\sqrt{s}-\gamma)^{\nu-1}}{(\sqrt{s}+\gamma)^{\nu+1}}\, e^{-a_\nu\sqrt{s}}$$

gesetzt, so folgt

$$\Psi_{2,\nu}(s) = \Psi_{1,\nu}(s^2) = \frac{(s-\gamma)^{\nu-1}}{(s+\gamma)^{\nu+1}}\, e^{-a_\nu s} \qquad (a_\nu \in (0,\infty)).$$

Da diese Funktion Laplace-Transformierte ist, so auch

$$\Psi_{2,\nu}(s-\gamma) = \frac{(s-2\gamma)^{\nu-1}}{s^{\nu+1}}\, e^{-a_\nu(s-\gamma)} = \sum_{\varkappa=0}^{\nu-1}\binom{\nu-1}{\varkappa}(-2\gamma)^{\varkappa}\,\frac{e^{-a_\nu(s-\gamma)}}{s^{\varkappa+2}}$$

$$= L\left\{\sum_{\varkappa=0}^{\nu-1}\binom{\nu-1}{\varkappa}\frac{(-2\gamma)^{\varkappa}}{(\varkappa+1)!}(t-a_\nu)^{\varkappa+1}e^{a_\nu\gamma}\right\} \qquad (t > a_\nu),$$

folglich auch

$$\Psi_{2,\nu}(s) = L\left\{e^{-\gamma t}\, L^{-1}\left\{\Psi_{2,\nu}(s-\gamma)\right\}\right\} \qquad (t > a_\nu)$$

und ebenfalls

$$\Psi_{1,\nu}(s) = \Psi_{2,\nu}(\sqrt{s}) = L\left\{\frac{t^{-\frac{3}{2}}}{2\sqrt{\pi}}\sum_{\varkappa=0}^{\nu-1}\binom{\nu-1}{\varkappa}\frac{(-2\gamma)^{\varkappa}}{(\varkappa+1)!}\int_{a_\nu}^{\infty}\tau(\tau-a_\nu)^{\varkappa+1}e^{-\frac{\tau^2}{4t}-\gamma(\tau-a_\nu)}d\tau\right\}.$$

Aus (11) ergibt sich hiermit nach nochmaliger Anwendung von Satz 2.1.10 die zweite Reihenentwicklung

$$P(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \Phi\left(\frac{\mu_1 t-1+\xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) + e^{2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}}\,\Phi\left(\frac{-\mu_1 t-1+\xi}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) +$$

$$+\sqrt{\frac{2}{\pi}}(\mu_2 t)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{(\mu_1 t)^2-2(1-\xi)\mu_1 t}{2\mu_2 t}} \sum_{\nu=0}^{\infty}(-1)^{\nu}\sum_{\varkappa=0}^{\nu}\frac{\left(-\frac{2\mu_1}{\mu_2}\right)^{\varkappa}}{(\varkappa+1)!} \times$$

$$\times\left[\binom{\nu-1}{\varkappa}\int_{2\nu+1-\xi}^{\infty}\tau(\tau-2\nu-1+\xi)^{\varkappa+1} e^{-\frac{\tau^2}{2\mu_2 t}-\frac{\mu_1}{\mu_2}(\tau-2\nu-1+\xi)}d\tau + \right. \tag{12}$$

$$\left. +\binom{\nu}{\varkappa}\int_{2\nu+1+\xi}^{\infty}\tau(\tau-2\nu-1-\xi)^{\varkappa+1} e^{-\frac{\tau^2}{2\mu_2 t}-\frac{\mu_1}{\mu_2}(\tau-2\nu-1-\xi)}d\tau\right]$$

und durch gliedweise Differentiation nach t[1)]

$$p(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\, t^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{(\mu_1 t)^2-2(1-\xi)\mu_1 t}{2\mu_2 t}} \sum_{\nu=0}^{\infty}(-1)^{\nu} \times$$

$$\times\left\{(2\nu+1-\xi)e^{-\frac{(2\nu+1-\xi)^2}{2\mu_2 t}}+(2\nu+1+\xi)e^{-\frac{(2\nu+1+\xi)^2}{2\mu_2 t}}+\sum_{\varkappa=0}^{\nu}\frac{\left(\frac{2\mu_1}{\mu_2}\right)^{\varkappa+1}}{\varkappa!}\times\right.$$

$$\times\left[\binom{\nu}{\varkappa+1}\int_{2\nu+1-\xi}^{\infty}\tau(\tau-2\nu-1+\xi)^{\varkappa} e^{-\frac{\tau^2}{2\mu_2 t}-\frac{\mu_1}{\mu_2}(\tau-2\nu-1+\xi)}d\tau + \right. \tag{13}$$

$$\left.\left. +\binom{\nu+1}{\varkappa+1}\int_{2\nu+1+\xi}^{\infty}\tau(\tau-2\nu-1-\xi)^{\varkappa} e^{-\frac{\tau^2}{2\mu_2 t}-\frac{\mu_1}{\mu_2}(\tau-2\nu-1-\xi)}d\tau\right]\right\}.$$

In diesen Formeln auftretende leere Summen sind Null zu setzen, ebenso Binomialkoeffizienten $\binom{i}{j}$ mit $i<j$.

Die in den eckigen Klammern auftretenden Integrale lassen sich auf das Gauß'sche Fehlerintegral zurückführen (vgl. z. B. GRÖBNER und HOFREITER [15], S. 109). Für das in der Entwicklung (3) dem Index

1) Bequemer findet man die Dichte, indem man ähnliche Methoden auf die der Gleichung (11) entsprechende Entwicklung für ψ anwendet.

$\nu = 0$ zugehörige Reihenglied ergibt sich

$$P_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \Phi\left[\frac{\mu_1 t-(1-\xi)}{\sqrt{\mu_2 t}}\right] + e^{2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}}\,\Phi\left[\frac{-\mu_1 t-(1-\xi)}{\sqrt{\mu_2 t}}\right] +$$

$$+2\left[\frac{(\mu_1 t)^2}{\mu_2 t}+(1+\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}+1\right]e^{\frac{2\mu_1}{\mu_2}}\,\Phi\left[\frac{-\mu_1 t-(1+\xi)}{\sqrt{\mu_2 t}}\right] - \qquad (14)$$

$$-\sqrt{\frac{2}{\pi\mu_2 t}}\,\mu_1 t\, e^{-\frac{(\mu_1 t)^2-2(1-\xi)\mu_1 t-(1+\xi)^2}{2\mu_2 t}} ,$$

und für das $\nu = 0$ entsprechende Anfangsglied für die Dichte findet man

$$p_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \frac{d}{dt}\,P_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$$

$$= \frac{1-\xi}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\,t^{-\frac{3}{2}}\,e^{-\frac{(\mu_1 t)^2-2(1-\xi)\mu_1 t+(1-\xi)^2}{2\mu_2 t}} + \qquad (15a)$$

$$+\frac{1+\xi-2\mu_1 t}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\,t^{-\frac{3}{2}}\,e^{-\frac{(\mu_1 t)^2-2(1-\xi)\mu_1 t+(1+\xi)^2}{2\mu_2 t}} + \qquad (15b)$$

$$+\frac{2\mu_1^2}{\mu_2}\,e^{\frac{2\mu_1}{\mu_2}}\,\Phi\left[\frac{-\mu_1 t-(1+\xi)}{\sqrt{\mu_2 t}}\right] . \qquad (15c)$$

Diese zweite konvergente Entwicklung (12) und (13) ist für $t \to 0$ asymptotisch und deshalb zur Berechnung der Verteilung in der Umgebung von $t = 0$ besonders geeignet. Die erste Entwicklung 3.2(4) ist asymptotisch für $t \to +\infty$ und daher zur Auswertung großer t-Werte nützlich.

Die gliedweise Anwendung des Grenzübergangs $\mathcal{P}_1$ (Satz 2.4.1) auf die Berührungsentwicklung 2.3(8) führt nicht zu einer weiteren Reihe für $p(t)$, da jedes Entwicklungsglied den Grenzwert 0 liefert; Summierung und Grenzwertbildung sind nicht vertauschbar.

In ihrer unzerlegten Gestalt 2.3(6) konvergiert die Berührungsentwicklung gemäß 2.4(52a), 2.4(52 b) und 2.4(4) gegen die Grenzformel

$$\psi(s/\mu_1,\mu_2;\xi) = \overset{(aa)}{\psi}(s/\mu_1,\mu_2;\xi,1) + \overset{(aa)}{\psi}(s/\mu_1,\mu_2;\xi,0)\,\psi(s/\mu_1,\mu_2;0), \quad (76)$$

die im nächsten Kapitel Verwendung finden wird.

4. APPROXIMATION VON MAXIMUM-LIKELIHOOD-SCHÄTZFUNKTIONEN

4.1. Diskussion der Reihenentwicklungen

Bei Benutzung der vollständigen ersten oder zweiten Reihenentwicklung zur Parameterschätzung nach bekannten Methoden, z. B. der Maximum-Likelihood-Methode (MLM), würden handliche Ergebnisse nicht zu erwarten sein. Insofern hat der Grenzwertsatz 2.4.1 nicht zu einem hinreichend einfachen Ergebnis geführt. Der Gedanke liegt nahe, die MLM formal auf einen Anfangsteil einer der Reihenentwicklungen für p(t) anzuwenden und auf diese Weise Näherungen für die ML-Schätzfunktionen zu suchen. Es erhebt sich die Frage nach der zweckmäßigen Auswahl eines Anfangsteils.

Als Vorbedingung sollte man verlangen , daß das aus einem Anfangsteil durch formale Anwendung der MLM sich ergebende System der "Likelihoodgleichungen" eine Lösung besitzt. Es lässt sich zeigen, daß die aus dem ersten Glied der Entwicklung 3.2(4b) bestehende Näherung

$$\tilde{p}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = 2\mu_2 \frac{z_1^2 \sin\left[(1-\xi)z_1\right]}{2z_1 - \sin 2z_1} e^{(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2} - \frac{\mu_2}{\mu_2}\frac{z_1}{\sin^2 z_1}t}$$

auf ein Gleichungssystem ohne Lösung führt. Die Hinzunahme des zweiten Reihengliedes würde, wenn überhaupt eine Lösung, so doch keine einfach gebaute liefern. Wir verzichten daher hier auf die erste Reihenentwicklung 3.2(4b).

Beim Konvergenzbeweis für die zweite Reihenentwicklung in Ziffer 3.3 wurde gezeigt, daß das $(-1)^\nu$-fache des ν-ten Gliedes sowohl der Reihe 3.3(12) für P(t) als auch der Reihe 3.3(13) für p(t) im Falle $\mu_1 \in (-\infty, 0]$ jeweils Summe von auf $t > 0$ nichtnegativen Funktionen ist. Für $\nu = 0$ besagt dies, daß $P_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ und $p_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ für $\mu_1 \in (-\infty,0]$ auf $t > 0$ nichtnegative Funktionen sind, was man dem Ausdruck 3.3(15) unmittelbar ansehen kann. $P_0(t)$ ist jedoch nicht Verteilungsfunktion, da offensichtlich

$$\lim_{t\to\infty} P_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = +\infty \qquad (\mu_1 \in (-\infty, 0)),$$

und bietet sich somit auch nicht als brauchbare Näherung für P(t) an.

Diese Grenzwertgleichung ist gleichbedeutend mit der aus 3.3(3) ablesbaren Beziehung

$$\psi_0(0/\mu_1,\mu_2;\xi) = L\{p_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi)\}_{s=0} = +\infty \quad (\mu_1 \in (-\infty,0)).$$

Es gelten sogar die Gleichungen $\psi_\nu(0/\mu_1,\mu_2;\xi)=+\infty$ für $\nu = 0,1,2,\ldots$, wobei ψ_ν das ν-te Glied der Reihe 3.3(3) bezeichnet (vgl.3.3(4)). Sie widersprechen, wie sich aus Satz 2.1.8 ergab, nicht dem Umstand, daß die Reihe $\{L^{-1}\{\psi_\nu\}\} = \{p_\nu(t)\}$ fast überall gegen p(t) konvergiert, sondern sie zeigen nur an, daß die Konvergenzabszisse von $L\{p_\nu\}$ für alle ν größer als Null ist; für die Konvergenz der Reihe genügt es eben, daß es eine (wenn auch noch so große) Zahl x_0 gibt, so daß sämtliche $L\{p_\nu\}$ für $\Re s \geq x_0$ existieren.

Für $\mu_1 \in (0,\infty)$ dagegen liegt der Punkt s = 0 für jedes ν in der Konvergenzhalbebene von $L\{p_\nu\}$, so daß die nach 3.3(3) bestehenden Gleichungen

$$\psi_0(0/\mu_1,\mu_2;\xi) = 1, \quad \psi_\nu(0/\mu_1,\mu_2;\xi) = 0 \quad (\nu = 1,2,\ldots)$$

anzeigen, daß die Normierung $\int_0^\infty p(t/\mu_1,\mu_2;\xi)dt = 1$ bereits durch das nullte Glied p_0 der Reihe 3.3(13) bewirkt wird; alle weiteren Glieder liefern zu dem Integral den Beitrag 0:

$$\int_0^\infty p_0(t/\mu_1,\mu_2;\xi)\,dt = 1, \quad \int_0^\infty p_\nu(t/\mu_1,\mu_2;\xi)\,dt = 0 \quad (\mu_1 \in (0,\infty);\ \nu = 1,2,\ldots), \quad (7)$$

woraus in Verbindung mit Satz 2.1.3 folgt, daß $p_\nu(t)$ für jedes $\nu = 1, 2, \ldots$ sowohl positive wie auch negative Werte auf $t > 0$ annimmt. Das erschwert die Entscheidung, ob die nach dem ν-ten Glied abgebrochene Reihe stets eine Verteilungsdichte ist. Sogar für $p_0(t)$ kann dies aus 3.3(15) nicht ohne weiteres entschieden werden.

Als Diskussionsergebnis ist festzuhalten: Die Integrale

$$\int_0^t \sum_{\nu=0}^{m} p_\nu(\tau/\mu_1,\mu_2;\xi)\,d\tau \qquad (m = 0,1,2\ldots)$$

divergieren im Falle $\mu_1 \in (-\infty,0)$ für $t \to \infty$ gegen ∞ für jedes m. Für $\mu_1 \in (0,\infty)$ konvergieren die Integrale für $t \to \infty$ gegen 1 für jedes m, doch ist nicht bekannt, ob sie Verteilungsfunktionen darstellen. Selbst wenn dies zuträfe, würde die formale Anwendung der MLM auf das Glied $p_0(t)$, da schon dieses aus mehreren Summanden besteht, zu ganz unhandlichen Schätzfunktionen führen.

Die Gleichungen (1) legen nahe, die Glieder $p_1(t)$, $p_2(t)$,... als Korrekturen des Anfangsgliedes $p_0(t)$ aufzufassen. Aber sogar p_0 enthält noch einen additiven Anteil mit verschwindendem Integral, nämlich die beiden letzten Summanden in 3.3(15). Werden sie zusammen mit p_1, p_2, ... vernachlässigt, so bleiben als Hauptterm in der Entwicklung von P(t) nur die zwei ersten Summanden von 3.3(14) übrig, die mit $P^{(\cdot a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ übereinstimmen. In der folgenden Ziffer wird diese Vernachlässigung durch einen weiteren Grenzwertsatz gerechtfertigt.

.2. Zweite Approximation von $\psi_{k,N}(s)$ für großes N

Vor der Formulierung eines weiteren Grenzwertsatzes, der eine Verbindung zwischen P(t) und $P^{(\cdot a)}(t)$ herstellen wird, werde die Bezeichnungsweise $P_{M,M+k,M+N}(t)$ durch die Festsetzung

$$P_{M,M+k,M+N}(t/\lambda,\mu) \equiv P_{k,N}(t/\lambda,\mu) \qquad (M=0,\pm1,\dots) \tag{7}$$

eingeführt. Mit ihr soll angezeigt werden, daß die N + 1 Zustände statt auf die Zahlen von 0 bis N auf die ganzen Zahlen von M bis M + N abgebildet werden, was ganz belanglos ist. M soll den reflektierenden, M + N den adsorbierenden Rand und M + k den Anfangszustand bezeichnen. Diese Indizierung soll auch auf p sowie auf $\psi = L\{p\}$ übertragen werden.

Satz 1: Gegeben seien vier Folgen k_m, N_m, $\lambda^{(m)}$ und $\mu^{(m)}$ mit den in Satz 2.4.1 genannten Eigenschaften I und II. Zusätzlich sei gegeben

III. eine Folge

$$\{\nu_m\} \qquad (m = 1, 2, \dots)$$

nichtnegativer ganzer Zahlen, so daß

$$\lim_{m\to\infty} \frac{\nu_m}{N_m} = +\infty \quad . \tag{2}$$

Dann konvergiert die Folge der Verteilungsfunktionen

$$\mathcal{P}_2 = \left\{ P_{-\nu_m,k_m,N_m}(t/\lambda^{(m)},\mu^{(m)}) \right\} \qquad (m=1,2,\dots),$$

die den Folgen $\{k_m\}$, $\{N_m\}$, $\{\lambda^{(m)}\}$, $\{\mu^{(m)}\}$ und $\{\nu_m\}$ zugeordnet ist, für $m \to \infty$ gegen die durch 2.4(47) gegebene stetige Verteilungsfunktion

$$P^{(\cdot a)}(t/\mu_1, \mu_2; \xi).$$

Unter den in diesem Satz gebrauchten Begriff "Verteilungsfunktion" soll auch $P^{(\cdot a)}(t/\mu_1, \mu_2; \xi)$ für $\mu_1 \in (-\infty, 0)$ fallen (vgl.2.4(46)).

Der Beweis verläuft nicht wesentlich anders als der des Satzes 2.4.1 und soll deshalb nicht mehr in voller Ausführlichkeit dargelegt werden. Es genüge hier zu zeigen, und zwar zunächst für $\mu_1 \in [0, \infty)$, daß die Folge

$$\left\{ \psi_{-\nu_m, k_m, N_m}(s/\lambda^{(m)}, \mu^{(m)}) \right\} \tag{3}$$

in der Halbebene $\Re s \geq 0$ gegen die durch 2.4(45) gegebene, auf $\Re s = 0$ stetige Grenzfunktion $\psi^{(\cdot a)}(s/\mu_1, \mu_2; \xi)$ konvergiert. In Verbindung mit Satz 2.1.4 folgt daraus die Behauptung des Satzes. Sei nun $\mu_1 \in [0, \infty)$. Für $s = 0$ ist der Satz richtig.

Für $s \in \{\Re s \geq 0, s \neq 0\}$ wird zunächst die Ungleichung

$$\left| \frac{w_1}{w_2} \right| \neq 1 \qquad (\Re s \geq 0,\ s \neq 0) \tag{4}$$

bewiesen. Dabei dürfen wir, da $\lambda^{(m)} \mu^{(m)} \neq 0$ für fast alle m, $\lambda\mu \neq 0$ voraussetzen.

Nach 2.4(18) gilt $\frac{w_1}{w_2} = \frac{v_1}{v_2}$, so daß wegen der für jedes komplexe s gültigen Gleichung $v_1(s) v_2(s) = 1$ (vgl. 2.4(19)) nur gezeigt zu werden braucht, daß die Gleichung $|v_2(s)| = 1$ für kein $s_0 \in \{\Re s \geq 0, s \neq 0\}$ erfüllt ist. Mit 2.4(18) folgt aus dem Ansatz

$$v_2(s_0) \equiv \frac{s'(s_0)}{2} + \sqrt{\frac{s'^2(s_0)}{4} - 1} = e^{i\vartheta} \qquad (\vartheta \text{ reell})$$

zunächst

$$s'(s_0) = 2\cos\vartheta$$

$$= \sqrt{\frac{\lambda}{\mu}} + \sqrt{\frac{\mu}{\lambda}} + \frac{s_0}{\sqrt{\lambda\mu}} \qquad (\text{vgl. } 2.2(8))$$

und hieraus in der Tat $s_0 < 0$. Ungleichung (4) ist also richtig; offenbar gilt

$$\left|\frac{w_1}{w_2}\right| < 1 \qquad (s \in \{\Re s \geq 0,\ s \neq 0\}). \tag{5}$$

Aus (5) und 2.2(5) folgt noch

$$w_2 \neq 0 \qquad (\Re s \geq 0,\ s \neq 0). \tag{6}$$

Ferner gilt nach 2.2(4) $w_1 = 1$ nur in dem hier ausgeschlossenen Punkt s = 0, so daß im folgenden stets

$$w_1 - 1 \neq 0. \tag{7}$$

Für $\mu_1 \in [0,\infty)$ ist nun nach 2.2(3) (der Index m wird unterdrückt) mit Benutzung von (6), (7) und 2.2(5)

$$\psi_{k+\nu,N+\nu}(s/\lambda,\mu) = \frac{w_2^{k+\nu+1} - w_1^{k+\nu+1} - \frac{\mu}{\lambda}\left(w_2^{k+\nu} - w_1^{k+\nu}\right)}{w_2^{N+\nu+1} - w_1^{N+\nu+1} - \frac{\mu}{\lambda}\left(w_2^{N+\nu} - w_1^{N+\nu}\right)}$$

$$= \frac{w_2^k - \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^k - w_2^k w_1 + \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^k w_2}{w_2^N - \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^N - w_2^N w_1 + \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^N w_2}$$

$$= \frac{w_2^k(1-w_1) + \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^k (w_2 - 1)}{w_2^N(1-w_1) + \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^N (w_2 - 1)}$$

$$\frac{w_2^k + \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^k \frac{w_2 - 1}{1 - w_1}}{w_2^N + \left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1} w_1^N \frac{w_2 - 1}{1 - w_1}}.$$

In $\{\Re s \geq 0, s \neq 0\}$ konvergiert w_2^N gemäß Gleichung 2.4(42). Folglich ist w_1^k beschränkt für $m \to \infty$ wegen (5). $\frac{w_2 - 1}{1 - w_2}$ ist ebenfalls beschränkt für $m \to \infty$, da gemäß 2.4(40), 2.4(41), 2.4(43) und 2.4(44a)

$$\frac{w_2 - 1}{1 - w_1} = \frac{N\left(w_2 - \frac{\mu}{\lambda}\right) + N\left(\frac{\mu}{\lambda} - 1\right)}{N\left(\frac{\mu}{\lambda} - w_1\right) + N\left(1 - \frac{\mu}{\lambda}\right)}$$

für $m \to \infty$ gegen $\frac{\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2} - \gamma}{\sqrt{\beta^2 s + \gamma^2} + \gamma}$ konvergiert. Da schließlich $\left(\frac{w_1}{w_2}\right)^{\nu+1}$

aufgrund von (5) gegen 0 strebt, ergibt sich

$$\lim_{m\to\infty} \psi_{k+\nu,N+\nu}(s/\lambda,\mu) = \lim_{m\to\infty} w_2^{k-N}$$

$$= \psi^{(\cdot a)}(s/\mu_1,\mu_2;\xi) \quad (\mu_1 \in [0,\infty))$$

nach 2.4(42) 2.4(45) und 2.4(1b).

Im Falle $\mu_1 \in (-\infty,0)$ wende man den Beweisgang statt auf (3) gemäß 2.3(4) auf die Folge

$$\left\{\left(\frac{\mu^{(m)}}{\lambda^{(m)}}\right)^{N_m-k_m} \psi_{k_m+\nu_m,N_m+\nu_m}(s/\lambda^{(m)},\mu^{(m)})\right\}$$

an und beachte 2.4(43).

Damit ist der Satz bewiesen. Der Fehler, der bei der Approximation von P(t) durch $P^{(\cdot a)}(t)$ begangen wird, besteht darin, daß im Zustand 0 die Reflexion aufgehoben wird und alle negativen Zustände in derselben Weise zugänglich werden wie die Zustände $[0,1)$. Aus den Ergebnissen der Ziffer 2.4 ergibt sich jedoch, daß der Fehler in den Fällen $\mu_1 \in [0,\infty)$ und $\mu_1 \in (-\infty,0)$ unterschiedlich ausgeprägt sein würde: der Prozeß $P^{(\cdot a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ führt zwar im ersteren Fall mit Wahrscheinlichkeit 1 zur Adsorption, im Fall $\mu_1 \in (-\infty,0)$ dagegen nur mit der kleineren Wahrscheinlichkeit $e^{2(1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ (vgl. 2.4(46)). Bei dem Prozeß $P(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ hat diese Wahrscheinlichkeit jedoch für jedes $\mu_1 \in (-\infty,0)$ den Wert 1, so daß zur Approximation von P(t) für $\mu_1 \in (-\infty,0)$ statt $P^{(\cdot a)}(t)$ besser die auf 1 normierte Verteilungsfunktion $P^{(\cdot a)*}(t)$ geeignet ist (vgl. 2.4(48)). Denn als die einzigen die Approximation mindernden Realisierungen umfaßt sie diejenigen, die den Rand 0 überschreiten, jedoch schließlich zurückkehren und im Zustand N zur Adsorption gelangen - ganz genau wie im Falle $\mu_1 \in [0,\infty)$ die Verteilungsfunktion $P^{(\cdot a)}(t)$.

Damit ist der Approximationsfehler auf die den Zustand 0 überschreitenden, jedoch wieder zurückkehrenden Realisierungen eingeengt.

Es liegt nahe, die Güte der Approximation durch die Wahrscheinlichkeit

$$\psi^{(aa)}(0/\mu_1,\mu_2;\xi,1) = e^{(1-\xi)\gamma}\frac{\operatorname{tin}\xi\gamma}{\operatorname{tin}\gamma} \qquad \text{(vgl. 2.4(52a))} \qquad (7a)$$

für Adsorption ohne voraufgehendes Berühren des reflektierenden Randes zu definieren. Sie ist bei festem μ_1,μ_2 eine monoton wachsende Funktion von ξ. Ihre Umkehrung nach ξ bei gegebenem

$$\psi^{(aa)}(0/\mu_1,\mu_2;\xi,1) = \varrho = \frac{1}{2}(1+\varepsilon) \quad (\varepsilon \in [-1,1))$$

lautet

$$\xi(\gamma,\varrho) = \varrho \qquad (\mu_1 = 0),$$

$$\left.\begin{aligned}\xi(\gamma,\varrho) &= \frac{1}{2\gamma}\log\frac{1}{1-\varrho(1-e^{-2\gamma})}\\ &= \frac{1}{2\gamma}\log\left[(1+\gamma\varrho\gamma)\sum_{\nu=0}^{\infty}(\varepsilon\gamma\varrho\gamma)^{\nu}\right]\end{aligned}\right\}\ (\mu_1 \neq 0).$$

Mit $\xi(\gamma,\varrho)$ ist der zweidimensionale Teilraum

$$\Omega_\varrho = \left\{-\infty < \mu_1 < \infty,\ 0 < \mu_2 < \infty,\ \xi\left(\frac{\mu_1}{\mu_2},\varrho\right)\right\} \subset \Omega$$

des gesamten Parameterraumes

$$\Omega = \left\{-\infty < \mu_1 < \infty,\ 0 < \mu_2 < \infty,\ 0 \le \xi < 1\right\} \qquad (8)$$

für jedes $\varrho \in [0,1)$ erklärt. Es gilt

Satz 2: Die Wahrscheinlichkeit für Adsorption ohne Berühren des reflektierenden Randes hat den Wert $\varrho \in [0,1)$ genau für die Parameterwerte $\omega = (\mu_1,\mu_2;\xi) \in \Omega_\varrho$.

Nunmehr werden wir die Verteilungsfunktion P(t) durch die Verteilungsfunktion

$$Q(t/\mu_1,\mu_2;\xi) \equiv P^{(\cdot a)}(t/|\mu_1|,\mu_2;\xi) \quad (t>0) \qquad (9)$$

approximieren:

$$P(t/\mu_1,\mu_2;\xi) \approx Q(t/\mu_1,\mu_2;\xi) \quad (\omega\in\Omega). \qquad (10)$$

3. Approximation von Maximum-Likelihood-Schätzfunktionen

In dieser Ziffer werden wir für die Parameter von $Q(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ die exakten Maximum-Likelihood-Schätzfunktionen herleiten. Werden sie gemäß 4.2(10) zur angenäherten ML-Schätzung der Parameter von P benutzt, muß eine a-priori-Entscheidung zwischen $\mu_1\in(-\infty,0)$ und $\mu_1\in(0,\infty)$ getroffen werden, weil aufgrund der Definition 4.2(9) von Q die Schätzung für ganz Ω (4.2(8)) nicht möglich ist. Wir werden daher das Schätzproblem getrennt für die Teilräume

$$\Omega^+ = \left\{0<\mu_1,\ 0<\mu_2,\ 0\le\xi<1\right\},\quad \Omega^- = \left\{\mu_1<0,\ 0<\mu_2;\ 0\le\xi<1\right\}$$

lösen, wozu wir die weiteren Teilräume

$$\Omega^+_{\xi=\xi_0} = \left\{0<\mu_1, 0<\mu_2\right\},\ \Omega^-_{\xi=\xi_0} = \left\{\mu_1<0,\ 0<\mu_2\right\}\ \left(\xi_0\in[0,1)\right), \qquad (1)$$

$$\Omega^+_{\mu_2=\mu_{2(0)}} = \left\{0<\mu_1, 0\le\xi<1\right\},\ \Omega^-_{\mu_2=\mu_{2(0)}} = \left\{\mu_1<0, 0\le\xi<1\right\}\left(\mu_{2(0)}\in(0,\infty)\right) \qquad (2)$$

$$\Omega_{\mu_1=\mu_{1(0)}} = \left\{0<\mu_2,\ 0\le\xi<1\right\} \qquad \left(\mu_{1(0)}\in(-\infty,\infty),\neq 0\right) \qquad (3)$$

benötigen werden.

In r unabhängigen Einzelversuchen sei die Reaktion (Tod) zu den Zeitpunkten $t_1, \ldots, t_r$ eingetreten. $\bar{t}$ und $\overline{\frac{1}{t}}$ seien die Stichprobenfunktionen

$$\bar{t} = \frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r} t_i , \qquad \overline{\frac{1}{t}} = \frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r} \frac{1}{t_i} . \tag{4}$$

Zwischen ihnen besteht bekanntlich die Ungleichung

$$\bar{t}\,\overline{\frac{1}{t}} - 1 \geq 0 , \tag{5}$$

in der das Gleichheitszeichen nur in den Stichprobenpunkten mit $t_1 = \ldots = t_r$ gilt.

Die ML-Schätzfunktionen für die Parameter μ_1, μ_2 und ξ von Q werden der Reihe nach mit $m_1^{(\cdot a)}$, $m_2^{(\cdot a)}$ und $x^{(\cdot a)}$ bezeichnet; sie stimmen für den Teilraum Ω und dessen Unterräumen mit den ML-Schätzfunktionen von $P^{(\cdot a)}$ überein, was im folgenden nicht mehr ausdrücklich hervorgehoben wird.

Aus 2.4(50) ergibt sich die Likelihoodfunktion

$$\frac{1}{r} L^{(\cdot a)}(\mu_1, \mu_2; \xi / \{t_i\}) = \log(1-\xi) - \frac{1}{2}\log\mu_2 - \frac{\mu_1^2}{2\mu_2}\bar{t} + (1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2} - \frac{(1-\xi)^2}{2\mu_2}\overline{\frac{1}{t}} + \text{const}, \tag{6}$$

aus der die Likelihoodgleichungen

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{r}\frac{\partial L^{(\cdot a)}}{\partial \mu_1} &= -\frac{\mu_1}{\mu_2}\bar{t} + \frac{1-\xi}{\mu_2} = 0 \\ \frac{1}{r}\frac{\partial L^{(\cdot a)}}{\partial \mu_2} &= -\frac{1}{2\mu_2} + \frac{\mu_1^2}{2\mu_2^2}\bar{t} - (1-\xi)\frac{\mu_1}{\mu_2^2} + \frac{(1-\xi)^2}{2\mu_2^2}\overline{\frac{1}{t}} = 0 \\ \frac{1}{r}\frac{\partial L^{(\cdot a)}}{\partial \xi} &= -\frac{1}{1-\xi} - \frac{\mu_1}{\mu_2} + \frac{1-\xi}{\mu_2}\overline{\frac{1}{t}} = 0 \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

folgen.

Satz 1: Für die Hypothesenräume Ω^+ und Ω^- gibt es keine eindeutige Parameterschätzung der Verteilungsfunktion $Q(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$. Für jeden der Teilräume (1), (2) und (3) dagegen existiert im gesamten Stichprobenraum folgende ML-Schätzung:

Für $\Omega^{\pm}_{\xi=\xi_0}$: $m_1^{(\cdot a)} = \pm\frac{1-\xi}{\bar t}$, $m_2^{(\cdot a)} = (1-\xi)^2\left(\frac{1}{\bar t}-\frac{1}{\bar t}\right)$; (8a)

für $\Omega^{\pm}_{\mu_2=\mu_{2(0)}}$: $m_1^{(\cdot a)} = \pm\frac{1}{\bar t}\sqrt{\frac{\mu_2}{\frac{1}{\bar t}-\frac{1}{\bar t}}}$, $x^{(\cdot a)} = 1-\sqrt{\frac{\mu_2}{\frac{1}{\bar t}-\frac{1}{\bar t}}}$; (8b)

für $\Omega_{\mu_1=\mu_{1(0)}}$: $m_2^{(\cdot a)} = \mu_1^2\,\bar t\left(\bar t\,\frac{1}{\bar t}-1\right)$, $x^{(\cdot a)} = 1-|\mu_1|\,\bar t$. (8c)

Beweis: Infolge der Definition 4.2(9) von Q genügt es, die für die Hypothesenräume Ω^+ aufgestellten Behauptungen zu beweisen. Die erste Behauptung des Satzes ergibt sich aus der aus 2.4(45) ablesbaren Beziehung

$$P^{(\cdot a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi) \equiv P^{(\cdot a)}\left(t/\frac{\mu_1}{1-\xi},\frac{\mu_2}{(1-\xi)^2};0\right) \quad (\xi\in(-\infty,1)), \qquad (9)$$

nach der die Schar der Verteilungsfunktionen nur zweiparametrig ist, insbesondere auch die Teilschar $\{0\le\xi<1\}$. Deshalb sind die Gleichungen des Systems (7) abhängig, was leicht zu erkennen ist. Die Schätzfunktionen (8) sind durch die für die verschiedenen Hypothesenräume geltenden Likelihoodgleichungen (7) eindeutig bestimmt und lassen sich elementar herleiten. Daß sie die Likelihoodgleichung jeweils im gesamten Stichprobenraum maximieren, ist ebenfalls elementar nachweisbar.

Aus (9) folgt, daß aus Q(t) die angenäherte Schätzung aller drei Parameter von P(t) auch mit anderen als ML-Schätzmethoden nicht möglich ist. Jedoch ist $\xi\in[0,1)$ bei vielen Anwendungen infolge seines besonderen Charakters bekannt (der Parameter kennzeichnet nicht den Prozeß (im kleinen), sondern die Anfangsverteilung (den Prozeß im großen). Im Vergiftungsmodell des ersten Kapitels wird man bei der Anwendung von P(t) zur Beschreibung der Lebensdauerverteilung z. B. $\xi = \xi_0 = 0$ setzen und natürlich die Approximation (9) in ihrer links stehenden Form benutzen.

Aus (5) folgt, daß alle in dem Satz genannten Schätzfunktionen $m_2^{(\cdot a)}$ nichtnegativ über dem gesamten Stichprobenraum und die Funktionen (8b) dort erklärt sind. $m_2^{(\cdot a)} = 0$ gilt genau für die Stichprobenpunkte

mit $t_1 = \ldots = t_r$. Die Schätzfunktionen $x^{(r,a)}$ können auch negative Werte annehmen, entsprechend dem Charakter von Q(t).

Für die Anwendung werden am bedeutsamsten die Schätzfunktionen (8a) sein. Die zweite Formel (8a) wird in der Physik zur Bestimmung der Diffusionskonstanten $\mu_2/2$ benutzt, wenn die Brown'sche Bewegung schwerer Partikel in vertikaler Richtung beobachtet wird (vgl. FRANK - v.MISES [13], Band II, S. 606).

4.4. Diskussion

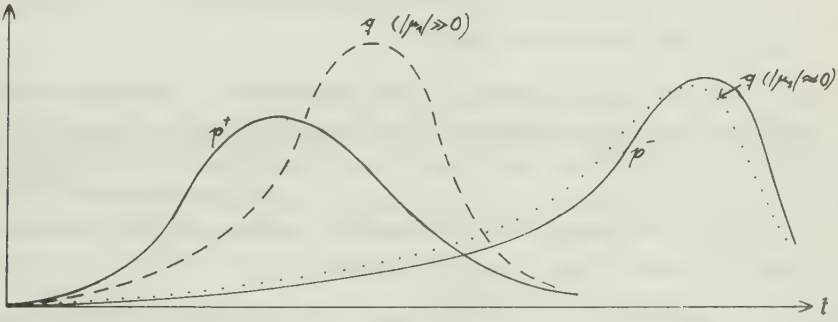
Die Dichtefunktion

$$g(t/\mu_1,\mu_2;\xi) = \frac{1-\xi}{\sqrt{2\pi\mu_2}}\, t^{-\frac{3}{2}}\, e^{-\frac{(1-\xi-|\mu_1|t)^2}{2\mu_2 t}}$$

zur Approximationsverteilung q(t) (vgl. 4.2(9)) genügt der Gleichung

$$g(t/-\mu_1,\mu_2;\xi) \equiv g(t/\mu_1,\mu_2;\xi) \qquad (t>0)$$

und ordnet somit jedem Wert $t \in (0,\infty)$ der Adsorptionszeit eine nur vom Betrage, nicht vom Vorzeichen von μ_1 abhängige Dichte zu, was sicher nicht befriedigend ist. Der genaueren Diskussion diene die folgende schematische Skizze.



Die Kurve p^+ stelle schematisch die Dichtefunktion $p(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ für einen Wert $\mu_1 \in (0,\infty)$ dar, p^- die Dichte $p(t/-\mu_1,\mu_2;\xi)$. Die Approximation $q(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ muß stets über größeren t-Werten als p^+ lokalisiert sein, was in der Skizze auch angedeutet ist (gestrichelte und punktierte Kurven).

Mit den abkürzenden Überschriften "$/\mu_1/ \gg 0$" und "$/\mu_1/ \approx 0$" ist gemeint, daß die nachfolgenden Bemerkungen desto schlüssiger sind, je größer bzw. je kleiner bei konstantem μ_2 und ξ der absolute Betrag von μ_1 ist.

a) $|\mu_1| \gg 0$.

α) Die Aufhebung des reflektierenden Randes bewirkt bei der Approximation von p^+ einen kleinen Fehler.

β) Bei der Approximation von p^- bewirkt die Umkehrung des negativen Wertes von μ_1 einen großen Fehler, dem die zusätzliche Aufhebung des reflektierenden Randes geringfügig entgegenwirkt. Der Gesamtfehler ist groß im Vergleich mit Fall α).

q hat den gestrichelten Verlauf.

b) $|\mu_1| \approx 0$ (jedoch $\mu_1 \neq 0$).

α) Die Aufhebung des reflektierenden Randes bewirkt bei der Approximation von p^+ einen großen Fehler im Vergleich mit Fall a) α).

β) Bei der Approximation von p^- wird die Umkehrung des negativen Wertes von μ_1 in ihrer Wirkung sehr stark wieder aufgehoben durch die Entfernung des reflektierenden Randes. Der Gesamtfehler ist klein im Vergleich mit Fall a) β).

q hat den punktierten Verlauf.

Diese heuristische Betrachtung unserer Ergebnisse unterscheidet sich dadurch von den Überlegungen, die (vgl. 4.2(7a)) zu der Charakteristik $\psi^{(aa)}(0/\mu_1,\mu_2;\xi,\eta)$ für die Approximation geführt haben, daß sie für konstante Werte von μ_2 und ξ angestellt ist. Diese Betrachtungsweise ist im Hinblick auf Anwendungen interessant, weil vor allem ξ häufig von vornherein einen festen Wert hat. Im Fall

$$\xi = 0 \tag{7}$$

ist sie besonders schlüssig, weil der in Frage stehende reflektierende Rand mit Wahrscheinlichkeit 1 berührt wird. Das Ergebnis der Betrachtung läßt sich in die folgende Übersicht bringen:

Wert von μ_1	Approximation von p(t) durch q(t), wenn	
	$\lvert\mu_1\rvert \gg 0$	$\lvert\mu_1\rvert \approx 0$
positiv	gut ↔	schlecht
negativ	schlecht ↔	gut

Die aufeinander bezogenen heuristischen Urteile sind dabei durch Pfeile gekennzeichnet.

Für negatives μ_1 werden wir die bisher erhaltene Approximation nicht verbessern. Für eine Verbesserung würde die Reihe 3.3(13) sicherlich keinen Anhaltspunkt liefern, denn wir haben schon jetzt diese Reihe nicht verwendet, vielmehr statt ihres ersten Gliedes $p^{(\cdot a)}(t/\mu_1,\mu_2;\xi)$ die Funktion $p^{(\cdot a)}(t/-\mu_1,\mu_2;\xi)$ benutzt. Ihre weiteren Glieder vermögen natürlich nur den Fehler von $p^{(\cdot a)}(t/\mu_1)$, nicht den von $p^{(\cdot a)}(t/-\mu_1)$ zu korrigieren, so daß es ganz unmotiviert wäre, nun ein Reihenglied hinzuzuziehen. Im Fall $|\mu_1|\approx 0$ ist ohnehin eine gute Approximation zu erwarten, und der Fall $\mu_1 \ll 0$ ist von geringerem praktischen Interesse.

Für positives μ_1 dagegen werden wir die bisher erhaltene Approximation verbessern, indem wir zu $p^{(\cdot a)}(t)$ die Summanden 3.3(15b) und 3.3(15c) hinzufügen (wobei wir jedoch nach wie vor das Ziel im Auge behalten, handliche Schätzfunktionen zu gewinnen). Dabei wollen wir uns auf den für Anwendungen besonders wichtigen Fall $\xi = 0$ (vgl.auch (1)) beschränken. Dann nimmt die Charakteristik $\psi^{(aa)}(\vartheta/\mu_1,\mu_2;\xi)$ ihren ungünstigsten Wert 0 an (vgl.4.2(7a)), so daß eine Verbesserung wünschenswert ist. Außerdem stimmen für $\xi=0$ die in 3.3(15a) und 3.3(15b) auftretenden Exponentialfunktionen überein.

4.5. Verbesserte Maximum-Likelihood-Schätzfunktionen für den Hypothesenraum $\mathfrak{B}^{+}_{\xi=0}$

Die Addition des Summanden 3.3(15b) zu der bisher benutzten Verteilungsdichte 3.3(15a) führt auf die Summe

$$\sqrt{\frac{2}{\pi\mu_2}}\, t^{-3/2}(1-\mu_1 t)\, e^{-\frac{(1-\mu_1 t)^2}{2\mu_2 t}}. \qquad (1)$$

Statt des dritten Summanden 3.3(15c) benutzen wir eine Approximation, die wir aus der für $z \to 0$ gültigen asymptotischen Äquivalenz

$$\sqrt{2\pi}\, e^{\frac{1}{2z^2}}\, \Phi(-\tfrac{1}{z}) \sim z \qquad (z \to 0) \qquad (2)$$

mit

$$z = \frac{\sqrt{\mu_2 t}}{1+\mu_1 t} \tag{3}$$

herleiten:

$$\frac{2\mu_1^2}{\mu_2} e^{\frac{2\mu_1}{\mu_2}} \Phi\left(\frac{-\mu_1 t - 1}{\sqrt{\mu_2 t}}\right) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi\mu_2}} \frac{t^{-3/2}}{1+\mu_1 t} (\mu_1 t)^2 e^{-\frac{(1-\mu_1 t)^2}{2\mu_2 t}}. \tag{4}$$

Zu (1) addiert ergibt sich die Näherung

$$\tilde{p}_0(t/\mu_1,\mu_2;0) = \sqrt{\frac{2}{\pi\mu_2}} \frac{t^{-3/2}}{1+\mu_1 t} e^{-\frac{(1-\mu_1 t)^2}{2\mu_2 t}} \qquad (\mu_1 \in (0,\infty)) \tag{5}$$

für das Anfangsglied $p_0(t)$. Sie ist nach (2) und (3) desto besser, je größer bei fest gewähltem positivem ϑ das Wahrscheinlichkeitsmaß für die Menge der Stichprobenpunkte $\{\mu_2 t < \vartheta\}$ ausfällt, d. h. je weniger sich die Funktion

$$P_t\{\mu_2 t < \vartheta\} = P\left(\frac{\vartheta}{\mu_2}/\mu_1,\mu_2;0\right) \qquad (\vartheta \in (0,\infty)) \tag{6}$$

von der über $\Omega^+_{\xi=0}$ erklärten konstanten Funktion 1 unterscheidet. Es ist wünschenswert, ein Approximationskriterium ohne Bezug auf ein festes ϑ zu formulieren. Dies geschieht mit

Satz 1: Auf jedem Halbstrahl $\vartheta \geq \vartheta_0 \in (0,\infty)$ gilt gleichmäßig bezüglich ϑ

$$\lim_{\gamma\to\infty} P\left(\frac{\vartheta}{\mu_2}/\mu_1,\mu_2;0\right) = 1 \qquad \left(\gamma = \frac{\mu_1}{\mu_2}\right). \tag{6a}$$

Im Sinne dieses Satzes approximiert (5) das Anfangsglied $p_0(t/\mu_1,\mu_2;0)$ desto besser, je größer γ ist.

Beweis: Nach Satz 2.4.3 ist $P\left(\frac{\vartheta}{\mu_2}/\mu_1,\mu_2;0\right)$ bei gegebenem ϑ nur von γ abhängig. Wir können daher bei festem ϑ, ohne die Allgemeinheit einzuschränken, den Grenzübergang $\gamma\to\infty$ mittels $\mu_1\to\infty$ bei festem μ_2 durchführen. Dann ist $\frac{\vartheta}{\mu_2}$ konstant, und da $P(t/\mu_1,\mu_2;0)$ für $t\in(0,\infty)$ monoton mit μ_1 wächst, so wächst $P\left(\frac{\vartheta}{\mu_2}/\mu_1,\mu_2;0\right)$ monoton mit γ. Der Entwicklung 3.3(12) entnimmt man unmittelbar $\lim_{\gamma\to\infty} P\left(\frac{\vartheta_0}{\mu_2}/\mu_1,\mu_2;0\right) = 1$, und weil $P\left(\frac{\vartheta}{\mu_2}/\mu_1,\mu_2;0\right)$ monoton mit ϑ wächst, gilt (6a) gleichmäßig für $\vartheta\geq\vartheta_0$.

Auch die mit 4.2(7a) eingeführte Charakteristik $\psi^{(aa)}(0/\mu_1,\mu_2;\xi,1)$ ist bei festem ξ, insbesondere für $\xi=0$, eine monoton mit γ wachsende Funktion. Aufgrund von Satz 1 können wir einfach γ als Approximationsmaß benutzen.

Wir werden nun auf die Näherung $\tilde{p}_0(t)$, die auf $t>0$ positiv ist, formal die Likelihoodmethode anwenden. Wir legen nur den Hypothesen-

raum $\Omega^{+}_{\xi=0} = \{0 \leq \mu_1 < \infty,\ 0 < \mu_2 < \infty,\ \xi = 0\}$ zugrunde und benutzen wieder die Stichprobenfunktionen 4.3(4).

Die Likelihoodfunktion lautet

$$\tilde{L}_0(\mu_1,\mu_2;0|\{t_i\}) = -\frac{1}{2}\log\mu_2 - \frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r}\log(1+\mu_1 t_i) - \frac{\mu_1^2}{2\mu_2}\bar{t} + \frac{\mu_1}{\mu_2} - \frac{1}{2\mu_2}\overline{\frac{1}{t}} + \text{const.} \quad (7)$$

Die Approximationen der Likelihoodgleichungen lauten

$$\frac{1}{r}\frac{\partial\tilde{L}_0}{\partial\mu_1} = -\frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r}\frac{t_i}{1+\mu_1 t_i} - \frac{\mu_1}{\mu_2}\bar{t} + \frac{1}{\mu_2} = 0, \quad (8a)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial\tilde{L}_0}{\partial\mu_2} = -\frac{1}{2\mu_2} + \frac{\mu_1^2}{2\mu_2^2}\bar{t} - \frac{\mu_1}{\mu_2^2} + \frac{1}{2\mu_2^2}\overline{\frac{1}{t}} = 0. \quad (8b)$$

Aus ihnen erhält man

$$\frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r}\frac{t_i}{1+\mu_1 t_i} = \frac{1-\mu_1\bar{t}}{\mu_2}, \quad (9a)$$

$$\mu_2\bar{t} = (1-\mu_1\bar{t})^2 + \bar{t}\,\overline{\frac{1}{t}} - 1. \quad (9b)$$

(8b) stimmt mit der zweiten Gleichung 4.3(7) (für $\xi = 0$) überein. Deshalb erhalten wir für den Teilraum $\mu_1 = \text{const.}$ dieselbe Schätzfunktion wie bei der Approximation durch Q:

$$m_2 \equiv m_2^{(a)} \qquad (\mu_1 = \text{const}).$$

Für den ganzen Raum $\Omega^{+}_{\xi=0}$ dagegen gilt

$$m_1 < \frac{1}{\bar{t}}, \quad (10)$$

da andernfalls die linke, aber nicht die rechte Seite von (9a) positiv wäre. Aufgrund von 4.3(8a) (für $\xi = 0$) folgt

$$m_1 < m_1^{(a)},$$

und diese Ungleichung besagt, daß bei der Approximation durch $P^{(a)}$ die Schätzung von μ_1 systematisch überhöht ist, was der Anschauung ganz entspricht. Aus (9b) und (10) folgt für m_2 die Abschätzung

$$\overline{\frac{1}{t}} - \frac{1}{\bar{t}} < m_2 \leq \overline{\frac{1}{t}}, \quad (11)$$

nach der die Schätzfunktion 4.3(8a) (für $\xi = 0$) den Parameter μ_2 systematisch unterschätzt:

$$m_2 > m_2^{(\cdot a)}.$$

Eliminiert man aus (9a) m_2 mit Hilfe von (9b), so erhält man für $m_1 \bar{t}$ die Gleichung

$$f(m_1 \bar{t}) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{r} \frac{t_i}{1 + m_1 \bar{t} \frac{t_i}{\bar{t}}} - \frac{(1 - m_1 \bar{t})\,\bar{t}}{(1 - m_1 \bar{t})^2 + \bar{t}\,\frac{1}{t} - 1} = 0. \qquad (12)$$

Aus

$$f(0) = \bar{t} - \frac{1}{\frac{1}{t}} > 0$$

und

$$f(1) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{r} \frac{t_i}{1 + \frac{t_i}{t}} > 0$$

folgt, daß f im Intervall (10) eine gerade Anzahl von Nullstellen hat. Wir zeigen, daß die auf $t > 0$ positive, für $t \to o$ und $t \to \infty$ gegen Null strebende Approximation (5) der Verteilungsdichte für jedes $\omega \in \Omega^{+}_{\xi=0}$ genau ein Maximum hat, so daß die Existenz einer ML-Lösung erwartet werden darf. Aus dem Ansatz

$$\frac{d}{dt} \log \tilde{p}_o = -\frac{3}{2t} - \frac{\mu_1}{1 + \mu_1 t} - \frac{\mu_1^2}{2\mu_2} + \frac{1}{2\mu_2 t^2} = 0$$

findet man für $\mu_1 = 0$ die einzige Lösung $t = \frac{1}{3\mu_2}$ und für $\mu_1 \in (0, \infty)$ die algebraische Gleichung dritten Grades

$$t^3 + \frac{\mu_1^2 + 5\mu_1\mu_2}{\mu_1^3} t^2 + \frac{3\mu_2 - \mu_1}{\mu_1^3} t - \frac{1}{\mu_1^3} = 0,$$

die nach der Descartes'schen Vorzeichenregel genau eine positive Wurzel hat.

Die zweiten Ableitungen der Likelihoodfunktion lauten

$$\tilde{L}_{11} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \tilde{L}_o}{\partial \mu_1^2} = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{r} \left(\frac{t_i}{1 + \mu_1 t_i} \right)^2 - \frac{\bar{t}}{\mu_2},$$

$$\tilde{L}_{12} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \tilde{L}_o}{\partial \mu_1 \partial \mu_2} = -\frac{1}{\mu_2^2} (1 - \mu_1 \bar{t}),$$

$$\tilde{L}_{22} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \tilde{L}_o}{\partial \mu_2^2} = \frac{1}{2\mu_2^2} - \frac{1}{\mu_2^3 \bar{t}} \left[(1 - \mu_1 \bar{t})^2 + \bar{t}\,\frac{1}{t} - 1 \right]$$

$$= -\frac{1}{2\mu_2^2} \quad \text{aufgrund von (9b).}$$

Die ML-Lösung muß der Bedingung $\tilde{L}_{11}\tilde{L}_{22} - \tilde{L}_{12}^2 > 0$, d.h.

$$\frac{1}{2m_2^2}\left[\frac{\bar{t}}{m_2} - \frac{1}{\tau}\sum_{i=1}^{\tau}\left(\frac{t_i}{1+m_1 t_i}\right)^2\right] - \frac{1}{m_2^4}(1-m_1\bar{t})^2 > 0$$

und folglich, wegen $\tilde{L}_{22} < 0$, der Ungleichung $\tilde{L}_{11} < 0$ genügen:

$$\frac{1}{\tau}\sum_{i=1}^{\tau}\left(\frac{t_i}{1+m_1 t_i}\right)^2 < \frac{\bar{t}}{m_2}\,.$$

Danach liefert, wie zu erwarten, die größte Wurzel der Gleichung (12) die ML-Lösung. Ihr ist durch (9b) ein kleinstes m_2 zugeordnet.

Wir zeigen noch, daß die Näherung (5), die auf $t > 0$ zwar positiv ist, keine normierte Dichte ist. Wäre sie es, so müßte die nur von γ abhängige Funktion

$$\tilde{P}_0(\gamma) = \int_0^\infty \tilde{p}_0(t/\mu_1,\mu_2;0)\,dt$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty \frac{\tau^{-\frac{3}{2}}}{1+\gamma\tau}\, e^{-\frac{(1-\gamma\tau)^2}{2\tau}}\,d\tau \qquad (\gamma\in(0,\infty))$$

mit der Konstanten 1 identisch sein, so daß gelten müßte

$$\int_0^\infty e^{-2\gamma}\,\tilde{P}_0(\gamma)\,d\gamma = \frac{1}{2}\,.$$

Statt dessen ist

$$\int_0^\infty e^{-2\gamma}\,\tilde{P}_0(\gamma)\,d\gamma = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{\gamma=0}^\infty\int_{\tau=0}^\infty \frac{\tau^{-\frac{3}{2}}}{1+\gamma\tau}\, e^{-\frac{(1+\gamma\tau)^2}{2\tau}}\,d\tau\,d\gamma$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\eta=0}^\infty\int_{\tau=\frac{1}{2\eta}}^\infty \tau^{-\frac{5}{2}}\,\frac{e^{-\eta}}{\eta}\,d\tau\,d\eta$$

$$= \frac{4}{3\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \eta^{\frac{1}{2}}\,e^{-\eta}\,d\eta$$

$$= \frac{4}{3\sqrt{\pi}}\,\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{2}{3}\,.$$

Literaturverzeichnis

1. AITCHISON, J., und J. A. C. BROWN: "The lognormal distribution". Cambridge, At the University Press, 1963

2. BERKSON, J.: "Application of the logistic function to bio-assay". Journ. Amer. Statist. Assoc. 39 (1944), 357-365

3. BLISS, C. I.: "The method of probits". Science 79 (1934), 38-39

4. - : "The method of probits - a correction". Science 79 (1934), 409-410

5. - : "The calculation of the dosage-mortality curve". The Annals of Applied Biology 22 (1935), 134-167

6. - : "The comparison of dosage-mortality data". The Annals of Applied Biology 22 (1935), 307-333

7. CHANDRASEKHAR, S.: "Stochastic processes in physics and astronomy". Review of Modern Physics 15 (1943), 1-89

8. CHUNG, K. L.: "Markov chains with stationary transition probabilities". Springer-Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg, 1960

9. DOETSCH, G. : "Handbuch der Laplace-Transformation". Band I. Birkhäuser, Basel, 1950.

10. - : "Tabellen zur Laplace-Transformation und Anleitung zum Gebrauch". Springer-Verlag, Berlin und Göttingen, 1947

11. ERDELYI, A., u. a.: "Tables of Integral Transforms". Band I. New York, McGraw-Hill, 1954

12. FINNEY, D. J.: "Probit analysis". Cambridge, At the University Press, 1952.

13. FRANK, Ph., und R. v. MISES: "Die Differential- und Integralgleichungen der Mechanik und Physik". F. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1961

14. GADDUM, J. H.: "Methods of biological assay depending on a quantal response". Medical Research Council, Special Report Series No. 183 (1933), His Majesty's Sta. Of.

15. GRÖBNER, W. und N. HOFREITER: "Integraltafel". Erster Teil: Unbestimmte Integrale.
Springer-Verlag, Wien und Innsbruck, 1949

16. HEATHCOTE, C. R., und MOYAL, J. E.: "The random walk (in continuous time) and its application to the theory of queues".
Biometrika 46 (1959), 400-411

17. HEMMINGSEN, A. M.: "The accuracy of insulin assay on white mice".
Quarterly Journ. and Year book of Pharmacy 6 (1933), 39-80 und 187-218

18. KLINGER, H.: "Über die Verteilung des Ruinzeitpunktes bei beschränkter Risikoreserve".
Blätter der Deutschen Gesellschaft für Versicherungsmathematik VII, 2 (1965), 389-407

19. KOLMOGOROFF, A.: "Über die analytischen Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung".
Mathematische Annalen 104 (1931), 415

20. PERRON, O.: "Algebra". Band II: Theorie der algebraischen Gleichungen. De Gruyter & Co, 1951.

21. SAMPFORD, M.R.: "The estimation of response-time distributions".
I. "Fundamental concepts and general methods".
Biometrics 8 (1952), 13-32
II. "Multi-stimulus distributions".
Biometrics 8 (1952), 307-369
III. "Truncation and survival".
Biometrics 10 (1954), 531-561

22. SCHMETTERER, L.: "Einführung in die mathematische Statistik".
Springer-Verlag, Wien, 1956.

L e b e n s l a u f

Am 18. August 1930 wurde ich, Wolfgang Schmidt, als Sohn des Dessinateurs und Betriebsleiters Franz Schmidt und seiner Ehefrau Grete Schmidt, geb. Winter, in Essen geboren. Nach dem Besuch der Volksschule in Eindhoven (Holland) und in Gablonz wurde ich 1940 in die Oberschule für Jungen in Gablonz aufgenommen. Später, bis 1945, besuchte ich die Oberschule in Reichenberg. Die Schulzeit nahm 1946 ihren Fortgang mit dem Besuch der Bundesrealschule in Klagenfurt (Österreich), wo ich 1948 die Reifeprüfung ablegte. Nach zweijähriger Tätigkeit als Landarbeiter in der österreichischen Landwirtschaft begann ich 1950 an der Universität Münster Mathematik und Physik zu studieren. In Göttingen setzte ich 1953 das Studium der Mathematik in der wirtschaftswissenschaftlichen Richtung fort und beendete es 1956 mit der Diplom-Hauptprüfung.

Nach dem Examen arbeitete ich bis März 1959 an einem von der Deutschen Forschungsgemeinschaft vergebenen Auftrag über Biozönoseforschung, der von den Herren Prof. Dr. W. H. Fuchs und Prof. Dr. Stöhr wahrgenommen wurde. Bei der Zusammenarbeit mit Herrn Prof. Dr. Fuchs, dem Direktor des Instituts für Pflanzenpathologie und Pflanzenschutz an der Göttinger Universität, lernte ich die toxikologischen Fragestellungen kennen, die mich zu der vorliegenden Dissertation angeregt haben.
Von März 1959 bis Juni 1964 arbeitete ich als Referent für mathematisch-statistische Methoden im Statistischen Bundesamt in Wiesbaden.

Im Juli 1964 trat ich als Mathematiker in die Farbenfabriken Bayer AG in Leverkusen ein, wo ich bis heute tätig bin.